



HAL
open science

Simulation numérique d'ondes de choc dans un milieu bifluide : application à l'explosion vapeur

Théo Corot

► **To cite this version:**

Théo Corot. Simulation numérique d'ondes de choc dans un milieu bifluide : application à l'explosion vapeur. Analyse numérique [math.NA]. Conservatoire national des arts et metiers - CNAM, 2017. Français. NNT : 2017CNAM1125 . tel-01661506

HAL Id: tel-01661506

<https://theses.hal.science/tel-01661506>

Submitted on 12 Dec 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

École Doctorale des Sciences des Métiers de l'Ingénieur

Laboratoire de modélisation mathématique et numérique

THÈSE DE DOCTORAT

présentée par : **Théo COROT**

soutenue le : **11 Septembre 2017**

pour obtenir le grade de : **Docteur du Conservatoire National des Arts et Métiers**

Discipline : **Mécanique**

Simulation numérique d'ondes de choc dans un milieu bifluide

Application à l'explosion vapeur

THÈSE DIRIGÉE PAR

MERCIER Bertrand

Professeur, CNAM et INSTN

RAPPORTEURS

MAIRE Pierre-Henri

Directeur de recherche, CEA/CESTA

LOUBÈRE Raphaël

Directeur de recherche, CNRS et Université de Bordeaux

EXAMINATEURS

DESPRÉS Bruno

Professeur, Université Pierre-et-Marie-Curie

DUBOIS François

Professeur, CNAM et Université Paris-Sud

FORESTIER Alain

Professeur, INSTN

FACCANONI Gloria

Maître de conférences, Université de Toulon

Remerciements

Avant d'entrer dans le vif du sujet, je souhaite remercier différentes personnes qui ont permis que ce travail se déroule dans de si bonnes conditions.

Tout d'abord, je remercie tout particulièrement mon directeur de thèse, Bertrand Mercier, sans qui ce travail n'aurait pas pu être possible. Je te remercie pour la confiance que tu m'as accordé en me proposant ce sujet très intéressant, pour les encouragements et les remarques que tu as pu me faire et qui ont permis d'aboutir à ce travail. Je te remercie pour ta disponibilité et tes conseils qui m'ont mené à explorer des pistes auxquelles je n'aurais peut être pas pensé seul.

Je remercie également Pierre-Henri Maire et Raphaël Loubère qui m'ont fait l'honneur d'être les rapporteurs de ce travail de thèse durant une partie de l'été. Je vous remercie pour le temps que vous avez consacré à la relecture et pour les remarques enrichissantes qui ont suivi.

Je remercie Gloria Faccanoni, Bruno Després, Alain Forestier de m'avoir accompagné dans mon travail à différents moments de ces trois années. Merci pour votre disponibilité et vos conseils. Je vous remercie également, vous et François Dubois, de m'avoir fait l'honneur d'intégrer mon jury.

Je souhaite aussi remercier Emmanuel Labourasse pour les conseils donnés dans les derniers mois de thèse qui ont notamment mené à l'étude précise du défaut d'entropie.

Je souhaite aussi remercier les différents membre du laboratoire M2N. Tout d'abord Thierry Horsin et Iraj Mortazavi qui ont successivement diriger ce laboratoire. Un grand merci aussi à José pour les conseils lors de mes débuts dans l'enseignement et les discussions de couloir. Merci à Françoise de m'avoir confié ses TD d'algèbre linéaire durant mes deux dernières années de thèse. Je remercie tous les membres du laboratoire, Philippe, Olivier, Chloé et tout ceux que je pourrai oublier. Les discussion scientifiques ou non que nous avons pu avoir et votre bonne humeur ont rendu ces trois années très agréables. De manière plus général je souhaite remercier les membres de l'EPN6. Je remercie particulièrement Sophie.

Ces trois années de thèse auraient probablement été très différentes sans les personnes avec qui j'ai pu partager le bureau. J'aimerais particulièrement remercier Julia qui m'a accompagnée pendant une bonne partie de ces trois années. Un grand merci pour les cookies, les sorties découvertes des restos du quartier et les verres qu'on a pu boire ensemble. Un grand merci aussi à Maryam sans qui je n'aurais pas pu découvrir l'Iran. Merci aussi à Meriem pour les sorties dans nos derniers mois de rédactions. Je remercie aussi tous les stagiaires, post-doctorant, doctorants et ATER qui sont passés par le bureau.

Un grand merci à mes amis proches, Léo, Dylan et Quentin. Je souhaite particulièrement remercier Anasthase pour ces trois années de colocations et pour avoir supporté mes délirs plus absurdes les uns que les autres. Ce sera bientôt ton tour d'écrire ces quelques lignes qui signifieront la fin de ta thèse. Merci aussi aux Bretons exilés à Paris avec qui j'ai pu boire des coups plus ou moins régulièrement (plutôt moins dans la troisième année malheureusement) : Marion, Germain, Guéno, Thibault...

Pour finir, je remercie ma famille. Merci à mes parents pour leur soutien indéfectible. Merci à ma mère pour la relecture du manuscrit alors que c'était probablement incompréhensible pour elle. Merci à mon père pour les coups de main quand il s'agit de problèmes administratifs liés à l'éducation nationale. Merci à ma sœur aussi pour la relecture du manuscrit et les sorties aux concerts/bars bien méritées (surtout à la fin !). Merci à mon frère, toujours partant pour aller vadrouiller à l'autre bout du monde. Qu'aurais-je fait sans tes talents de négociateur en Birmanie ?

Résumé

Cette thèse s'intéresse à la simulation numérique de l'explosion vapeur. Ce phénomène correspond à une vaporisation instantanée d'un volume d'eau liquide entraînant un choc de pression. Nous nous y intéressons dans le cadre de la sûreté nucléaire. En effet, lors d'un accident entraînant la fusion du coeur du réacteur, du métal fondu pourrait interagir avec de l'eau liquide et entraîner un tel choc. On voudrait alors connaître l'ampleur de ce phénomène et les risques d'endommagements de la centrale qu'il implique.

Pour y parvenir, nous utilisons pour modèle les équations d'Euler dans un cadre Lagrangien. Cette description a l'avantage de suivre les fluides au cours du temps et donc de parfaitement conserver les interfaces entre l'eau liquide et sa vapeur. Pour résoudre numériquement les équations obtenues, nous développons un nouveau schéma de type Godunov utilisant des flux nodaux. Le solveur nodal développé durant cette thèse ne dépend que de la répartition angulaire des variables physiques autour du noeud.

De plus, nous nous intéressons aux changements de phase liquide-vapeur. Nous proposons une méthode pour les prendre en compte et mettons en avant les avantages qu'il y a à l'implémentation de ce phénomène dans un algorithme Lagrangien.

Mots clés : Hydrodynamique Lagrangienne, Schémas de type Godunov, Dynamique des gaz compressible, Écoulements multi-fluides, Explosion vapeur, Changement de phase liquide-vapeur.

Abstract

This thesis studies numerical simulation of steam explosion. This phenomenon corresponds to a fast vaporization of a liquid leading to a pressure shock. It is of interest in the nuclear safety field. During a core-meltdown crisis, molten fuel rods interacting with water could lead to steam explosion. Consequently we want to evaluate the risks created by this phenomenon.

In order to do it, we use Euler equations written in a Lagrangian form. This description has the advantage of following the fluid motion and consequently preserves interfaces between the liquid and its vapor. To solve these equations, we develop a new Godunov type scheme using nodal fluxes. The nodal solver developed here only depends on the angular repartition of the physical variables around the node.

Moreover, we study liquid-vapor phase changes. We describe a method to take it into account and highlight the advantages of using this method into a Lagrangian framework.

Keywords : Lagrangian hydrodynamics, Godunov type schemes, Compressible gas dynamics, multi-fluid flows, Steam explosion, Liquid-vapor phase change.

Table des matières

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Introduction | 25 |
| 1.1 | Fonctionnement d'une centrale nucléaire et explosion vapeur | 25 |
| 1.1.1 | Fonctionnement général | 25 |
| 1.1.2 | Circuit primaire | 26 |
| 1.1.3 | Risque d'explosion vapeur | 27 |
| 1.2 | Simulation numérique | 28 |
| 1.3 | Plan de thèse | 28 |
| 2 | Hydrodynamique Lagrangienne et Eulérienne multidimensionnelle | 31 |
| 2.1 | Cinématique d'un fluide | 32 |
| 2.1.1 | Description Eulérienne et Lagrangienne | 32 |
| 2.1.2 | Formule de transport | 35 |
| 2.1.3 | Formule de Nanson et identité de Piola | 36 |
| 2.2 | Les équations de conservation | 36 |
| 2.2.1 | Description Eulérienne et semi-Lagrangienne | 36 |
| 2.2.2 | Description Lagrangienne | 38 |
| 2.2.3 | Quelques remarques | 39 |
| 2.2.4 | Application aux équations d'Euler | 42 |
| 2.2.5 | Choix de la description | 43 |

TABLE DES MATIÈRES

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2.3 | Quelques résultats de thermodynamique | 44 |
| 2.3.1 | Premier principe de la thermodynamique | 44 |
| 2.3.2 | Second principe de la thermodynamique | 45 |
| 2.3.3 | Équation d'état | 45 |
| 3 | Schémas numériques existants | 49 |
| 3.1 | GLACE | 51 |
| 3.1.1 | Définitions | 51 |
| 3.1.2 | Le schéma GLACE | 53 |
| 3.1.3 | Quelques propriétés du schéma | 59 |
| 3.1.4 | Remarque sur la mise à jour de la densité | 61 |
| 3.1.5 | Résumé | 63 |
| 3.2 | EUCCLHYD | 63 |
| 3.2.1 | Discrétisation des équations | 64 |
| 3.2.2 | Le solveur nodal | 65 |
| 3.2.3 | Résumé | 66 |
| 3.2.4 | Propriétés du schéma | 67 |
| 3.3 | Calcul du pas de temps | 68 |
| 3.3.1 | Condition CFL | 68 |
| 3.3.2 | Variation du volume | 69 |
| 3.3.3 | Limitation de la croissance du pas de temps | 69 |
| 3.4 | Cas particulier d'un problème de Riemman unidimensionnel | 70 |
| 4 | Notre schéma | 73 |
| 4.1 | Définitions et généralités | 73 |
| 4.1.1 | Discrétisation des équations | 73 |
| 4.1.2 | Définitions | 74 |

TABLE DES MATIÈRES

| | | |
|-------|--|-----|
| 4.2 | Solveur nodal | 75 |
| 4.3 | Lien avec le solveur acoustique | 77 |
| 4.4 | Discrétisation temporelle | 79 |
| 4.4.1 | Discrétisation temporelle | 79 |
| 4.4.2 | Résumé | 80 |
| 4.5 | Conditions aux bords | 80 |
| 4.5.1 | Vitesse imposée | 81 |
| 4.5.2 | Mur glissant | 81 |
| 4.5.3 | Pression extérieure imposée | 83 |
| 4.5.4 | Conditions mixtes aux coins | 83 |
| 4.6 | Propriétés du schéma | 83 |
| 4.6.1 | Conservativité | 83 |
| 4.6.2 | Consistance faible | 83 |
| 4.6.3 | A propos de l'inégalité entropique | 91 |
| 4.7 | Inégalité entropique et θ -schéma | 92 |
| 4.7.1 | Présentation du schéma | 92 |
| 4.7.2 | θ -schéma et inégalité entropique | 94 |
| 4.8 | Une modification du schéma | 95 |
| 4.8.1 | Choix du terme d'accélération | 97 |
| 4.8.2 | Choix de la distance d_r | 97 |
| 4.8.3 | Reformulation du solveur nodal | 99 |
| 4.8.4 | Lien avec le solveur original | 99 |
| 4.9 | Extension à l'ordre 2 | 100 |
| 4.9.1 | Reconstruction linéaire | 100 |
| 4.9.2 | Discrétisation temporelle | 103 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 5 | Comparaison des schémas | 105 |
| 5.1 | Tests unidimensionnels | 105 |
| 5.1.1 | Tube à choc de Sod | 105 |
| 5.1.2 | Tube à choc de Leblanc | 113 |
| 5.1.3 | Piston uniformément accéléré | 116 |
| 5.2 | Tests multidimensionnels | 117 |
| 5.2.1 | Cas test de Saltzmann | 117 |
| 5.2.2 | Cas test de Sedov | 123 |
| 5.2.3 | Application d'un θ -schéma | 124 |
| 5.2.4 | Compression isentropique | 131 |
| 5.2.5 | Vortex dans une boîte | 136 |
| 5.2.6 | Instabilité de Richtmyer-Meshkov | 138 |
| 5.2.7 | Une première application à l'explosion vapeur | 141 |
| 5.3 | Conclusion | 153 |
| 6 | Changement de phase | 155 |
| 6.1 | Théorie | 156 |
| 6.1.1 | Loi d'état à l'équilibre | 157 |
| 6.1.2 | Vitesse du son | 160 |
| 6.2 | Discretisation | 164 |
| 6.2.1 | Méthode numérique pour la loi d'état à l'équilibre | 164 |
| 6.2.2 | Résolution grossière | 164 |
| 6.2.3 | Résolution précise | 165 |
| 6.3 | Quelques rappels sur le comportement de l'eau | 165 |
| 6.3.1 | Plan (τ, p) | 166 |
| 6.3.2 | Plan TS | 166 |

TABLE DES MATIÈRES

| | | |
|-------|--|------------|
| 6.4 | Quelques résultats numériques | 167 |
| 6.4.1 | Cavitation | 168 |
| 6.4.2 | Compression d'une bulle | 170 |
| 6.4.3 | Application à l'explosion vapeur | 172 |
| 6.5 | Comparaison de lois d'état | 173 |
| 6.5.1 | Les lois d'état | 173 |
| 6.5.2 | Application à un réacteur expérimental | 174 |
| 6.6 | Conclusion | 176 |
| | Conclusion et perspectives | 179 |
| | Bibliographie | 182 |
| | Annexes | 193 |
| | A Annexe | 193 |
| A.1 | Tenseurs de second ordre | 193 |
| A.1.1 | Définitions | 193 |
| A.1.2 | Identités tensorielles | 193 |
| A.2 | Transformation d'intégrales | 194 |
| A.2.1 | Théorème de la divergence | 194 |
| A.2.2 | Formule de transport généralisée | 194 |
| | B Annexe | 197 |
| B.1 | Calculs liés au solveur nodal | 197 |
| B.2 | Calcul de la pression et erreur de consistance | 200 |
| B.2.1 | Calcul de la pression | 200 |

TABLE DES MATIÈRES

| | | |
|-------|--|-----|
| B.2.2 | Résultat numérique | 202 |
| B.3 | Sensibilité aux modes en sablier | 204 |
| B.4 | Quelques résultats pour le développement tridimensionnel | 205 |
| B.4.1 | Calcul de \mathbf{n}_r^1 et \mathbf{n}_r^2 | 206 |
| B.4.2 | Calcul de A_r^1 et A_r^2 | 206 |
| B.4.3 | Calcul de Γ_r^1 et Γ_r^2 | 207 |
| B.4.4 | Conclusion | 208 |

Liste des tableaux

| | | |
|-----|---|-----|
| 5.1 | Tube à choc de Sod. Convergence pour le schéma non modifié. | 108 |
| 5.2 | Tube à choc de Sod. Convergence pour le schéma modifié. | 108 |
| 5.3 | Tube à choc de Sod. Convergence pour le schéma à l'ordre 2. | 109 |
| 5.4 | Piston uniformément accéléré. Convergence de la vitesse. | 117 |
| 5.5 | Compression isentropique. Convergence du rayon intérieur. | 137 |
| 5.6 | Compression isentropique. Convergence du rayon extérieur. | 137 |
| 5.7 | Coefficients des équations d'état. | 142 |
| 5.8 | Explosion vapeur. État initial. | 142 |
| 6.1 | Coefficients de l'équation d'état. | 168 |
| 6.2 | Compression d'une bulle de vapeur. | 170 |

LISTE DES TABLEAUX

Table des figures

| | | |
|-----|--|-----|
| 1.1 | Schéma de principe du fonctionnement d'une centrale nucléaire avec un réacteur à eau pressurisée. | 26 |
| 2.1 | Notations. | 32 |
| 3.1 | Normale nodale. | 53 |
| 3.2 | Répartition des vitesses et pressions sur le contour de la cellule j | 55 |
| 3.3 | Mur glissant. | 58 |
| 3.4 | Pression extérieure imposée. | 59 |
| 3.5 | Pressions nodales pour EUCCLHYD. | 64 |
| 3.6 | Problème de Riemann unidimensionnel autour du noeud r | 70 |
| 4.1 | Répartition angulaire autour du noeud r | 74 |
| 4.2 | Répartition angulaire au noeud r | 77 |
| 4.3 | Définitions pour les conditions aux bords à un noeud r | 81 |
| 4.4 | Définition de la longueur d_r | 97 |
| 4.5 | Choix du coefficient C_r | 98 |
| 4.6 | Choix de $d_r = 0.5\delta x_r$ sur un maillage déformé. | 99 |
| 5.1 | Tube à choc de Sod. Influence de C_r sur les résultats. Profil de pression (haut) et zoom sur la détente (bas) pour $C_r = 0.3$ (★), $C_r = 0.5$ (■), $C_r = 0.7$ (▼), le schéma non modifié (●) et solution exacte au temps $t = 0.1$. | 107 |

TABLE DES FIGURES

5.2 Tube à choc de Sod. Profil de pression pour le schéma non modifié (●), le schéma modifié avec $C_r = 0.5$ (■), le schéma à l'ordre 2 (▼) et solution exacte au temps $t = 0.1$ 107

5.3 Tube à choc de Sod. Zoom sur le maillage (gauche) et profil de la seconde composante de la vitesse (droite) pour (de haut en bas) notre schéma original, le schéma modifié, GLACE et EUCCLHYD au temps $t = 0.1$ 110

5.4 Tube à choc de Sod. Maillage triangulaire général initial. 111

5.5 Tube à choc de Sod sur un maillage général. Zoom sur le maillage (gauche) et profil de la deuxième composante de la vitesse nodale (droite) au temps $t = 0.1$ pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas). 112

5.6 Tube à choc de Sod sur un maillage général. Évolution de la première (haut) et seconde (bas) composante de la vitesse au niveau d'un noeud de la discontinuité de contact en fonction du temps pour notre schéma (●), GLACE (▼), EUCCLHYD (■) et solution analytique. 113

5.7 Tube à choc de Leblanc. Profils de vitesse (haut) et densité (bas) pour le schéma A et EUCCLHYD (●), GLACE (★), le schéma A modifié avec $C_r = 0.5$ (■), le schéma à l'ordre 2 (▼) et solution exacte au temps $t = 6$ 114

5.8 Tube à choc de Leblanc. Profil de densité pour le schéma A modifié (haut) et l'extension à l'ordre 2 (bas) sur les maillages M_1 (★), M_2 (▼), M_3 (●), M_4 (■) et solution exacte au temps $t = 6$ 115

5.9 Tube à choc de Leblanc. Profil de densité pour notre schéma (haut) et le schéma A (bas) sur les maillages M_1 (★), M_2 (▼), M_3 (●), M_4 (■) et solution exacte au temps $t = 6$ 116

5.10 Test de Saltzmann. Maillage initial. 118

5.11 Test de Saltzmann. Maillage pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 0.5$ 119

5.12 Test de Saltzmann. Profils de vitesse (gauche) et pression (droite) pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 0.5$ 120

TABLE DES FIGURES

5.13 Test de Saltzmann. Variation d'entropie pour notre schéma (●), GLACE (★) et EUCCLHYD (■) en fonction du temps. La partie basse de la figure est un zoom sur la partie haute. 121

5.14 Test de Saltzmann modifié. Maillage pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 0.005$ s. 122

5.15 Test de Saltzmann modifié. Profils de vitesse (gauche) et pression (droite) pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 0.005$ s. 123

5.16 Test de Sedov. Maillage pour notre schéma (haut) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 1$ 125

5.17 Test de Sedov. Profil de densité pour notre schéma (haut) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 1$ 126

5.18 Test de Sedov. Variation d'entropie pour notre schéma (●) et EUCCLHYD (■) en fonction du temps. La partie basse de la figure est un zoom sur la partie haute. 126

5.19 Test de Saltzmann. Maillages pour (de haut en bas) $\theta = 0.95$, le schéma entropique global, entropique local et EUCCLHYD au temps $t = 0.9$ 128

5.20 Test de Saltzmann. Profils de vitesse (gauche) et pression (droite) pour (de haut en bas) $\theta = 0.95$, le schéma entropique global, entropique local et EUCCLHYD au temps $t = 0.5$ 129

5.21 Test de Saltzmann. $\frac{\Delta\sigma_j}{\Delta t}$ pour $\theta = 0.95$ (■), le schéma entropique local (★), entropique global (▼) et le schéma classique sans modifications (●) en fonction du temps. La partie basse de la figure est un zoom sur la partie haute. 130

5.22 Test de Saltzmann modifié. Profils de vitesse (gauche) et pression (droite) pour (de haut en bas) $\theta = 0.95$, le schéma entropique global, entropique local et notre schéma non modifié au temps $t = 0.5$ 132

TABLE DES FIGURES

5.23 Test de Sedov. $\frac{\Delta\sigma_j}{\Delta t}$ pour $\theta = 0.95$ (■), le schéma entropique local (★), entropique global (▼) et le schéma classique sans modifications (●) au fonction du temps. La partie basse de la figure est un zoom sur la partie haute. . . . 133

5.24 Test de Sedov. Maillage pour (dans le sens de lecture) EUCCLHYD, notre schéma non modifié, $\theta = 0.95$, le schéma entropique global et entropique local au temps $t = 1$ 134

5.25 Test de Sedov. Profils de densité pour (dans le sens de lecture) EUCCLHYD, notre schéma non modifié, $\theta = 0.95$, le schéma entropique global et entropique local au temps $t = 1$ 135

5.26 Vortex. Amplitude de la vitesse à l'état initial (haut gauche) et au temps $t = 0.125$ pour notre schéma (haut droite), GLACE (bas gauche) et EUCCLHYD (bas droite). 138

5.27 Configuration initiale pour l'étude de l'instabilité de Richtmyer-Meshkov. . . 139

5.28 Instabilité de Richtmyer-Meshkov. Évolution de l'amplitude de la perturbation au cours du temps pour notre schéma (●), GLACE (★), EUCCLHYD (■) et théorie linéaire. 140

5.29 Instabilité de Richtmyer-Meshkov. Profil de la deuxième composante de la vitesse pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 6.5$ 140

5.30 Instabilité de Richtmyer-Meshkov. Évolution de l'amplitude de la perturbation au cours du temps pour les schémas GLACE (★) et EUCCLHYD (■) utilisant une unique pression nodale et théorie linéaire. 141

5.31 Explosion vapeur. Maillage initial (haut gauche) et maillages au temps $t = 2.10^{-4}$ s pour notre schéma (haut droite), EUCCLHYD (bas gauche) et GLACE (bas droite) 143

5.32 Explosion vapeur. Interface pour notre schéma, GLACE et EUCCLHYD au temps $t = 2.10^{-4}$ s. 145

TABLE DES FIGURES

| | | |
|------|---|-----|
| 5.33 | Explosion vapeur. Partie droite de l'interface pour notre schéma et EUCCLHYD au temps $t = 2.10^{-4}$ s. | 146 |
| 5.34 | Explosion vapeur. Pression (10^8 Pa, gauche) et densité (kg/m^3 , droite) en fonction de la distance au centre (m) pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 2.10^{-4}$ s. | 147 |
| 5.35 | Explosion vapeur. Vitesses radiale (m/s, gauche) et transverse (m/s, droite) nodales en fonction de la distance au centre (m) pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 2.10^{-4}$ s. | 148 |
| 5.36 | Explosion vapeur. Pressions (10^8 Pa) nodales pour notre schéma (●), notre schéma modifié (■) et le schéma d'ordre deux (+) en fonction de la distance au centre (m) au temps $t = 2.10^{-4}$ s. | 149 |
| 5.37 | Explosion vapeur. Évolution de la pression (10^8 Pa) au bord pour un rayon de bulle initial de 0.05 m (●), 0.1 m (■) et 0.2 m (▼) en fonction du temps (s). | 150 |
| 5.38 | Explosion vapeur. Maillage triangulaire initial. | 151 |
| 5.39 | Explosion vapeur. Pression (10^8 Pa) au centre des mailles (gauche) et nodales (droite) en fonction de la distance au centre (m) au temps $t = 2.10^{-4}$ s. | 151 |
| 5.40 | Explosion vapeur. Pression (Pa) au centre des mailles au temps $t = 2.10^{-4}$ s. | 152 |
| 5.41 | Alternance dans un maillage triangulaire. | 153 |
| 6.1 | Dôme de saturation dans le plan volume, pression. État initial et état après une itération d'un schéma numérique | 156 |
| 6.2 | Vitesse du son en fonction de la fraction volumique de liquide avec la loi de Wood (●) et la loi d'état à l'équilibre (■). | 163 |
| 6.3 | Courbe d'ébullition , courbe de rosée et isothermes dans le plan volume (kg/m^3) pression (<i>bar</i>). | 166 |
| 6.4 | Courbe d'ébullition et courbe de rosée dans le plan entropie (kJ/kg) température (K). | 167 |

TABLE DES FIGURES

| | | |
|------|--|-----|
| 6.5 | Cavitation. Profil de pression (10^8 Pa) sans changement de phase au temps $t = 0.0001$ s. | 169 |
| 6.6 | Cavitation. Profils de pression (MPa , haut gauche), fraction massique (haut droit), densité (kg/m^3 , bas gauche) et vitesse (m/s , bas droit) avec la vitesse de Wood et la vitesse à l'équilibre au temps $t = 0.0001$ s. | 169 |
| 6.7 | Compression d'une bulle de vapeur. | 170 |
| 6.8 | Compression d'une bulle de vapeur. Pression (MPa , haut gauche), fraction massique (haut droit), densité (kg/m^3 , bas gauche) et vitesse (m/s , bas droit) avec la vitesse de Wood et la vitesse à l'équilibre au temps $t = 0.003$ s. | 171 |
| 6.9 | Compression d'une bulle de vapeur. Courbe d'ébullition, courbe de rosée, chemins thermodynamiques des cellules (x), courbe isentropique et pression critique. | 172 |
| 6.10 | Explosion vapeur avec changement de phase. Pression (10^8 Pa, haut gauche), fraction volumique (haut droit), vitesse nodale radiale (m/s , bas gauche) et transverse (m/s , bas droit) en fonction de la distance au centre (m) au temps $t = 2.10^{-4}$ s. | 173 |
| 6.11 | Explosion vapeur. Comparaison entre l'utilisation de <i>stiffened gas</i> (haut) et Van Der Waals (bas). Pression (10^8 Pa, gauche) et vitesse radiale (m/s , droite) en fonction de la distance au centre (m) au temps $t = 2.10^{-4}$ s. | 175 |
| B.1 | Répartition angulaire autour du noeud r | 198 |
| B.2 | Vortex. Maillage initial. | 203 |
| B.3 | Vortex. Pression après une itération. | 203 |
| B.4 | Mode en sablier. Profil de la première composante de la vitesse initiale (haut gauche) et après cinq itérations pour notre schéma (haut droit), GLACE (bas gauche) et EUCCLHYD (bas droit). | 204 |

Chapitre 1

Introduction

Dans cette thèse nous nous intéressons à la simulation d'ondes de choc dans des milieux bifluïdes. Plus particulièrement, notre intérêt se porte, dans le cadre de la sûreté nucléaire, sur l'explosion vapeur. Ce phénomène apparaît lors d'un important apport d'énergie dans de l'eau liquide, typiquement lors d'un réchauffement instantané d'une partie du liquide. Cet apport d'énergie, entraînant une vaporisation instantanée d'une partie du liquide, induit un choc de pression.

Avant d'expliquer de quelle manière ce phénomène nous intéresse dans le cadre de la sûreté nucléaire, nous rappelons brièvement le fonctionnement d'un réacteur nucléaire à eau sous pression.

1.1 Fonctionnement d'une centrale nucléaire et explosion vapeur

1.1.1 Fonctionnement général

Le fonctionnement d'une centrale nucléaire se base essentiellement sur des échanges thermiques. La chaleur est produite grâce à des réactions nucléaires, puis est transformée en énergie.

Nous nous intéressons ici aux réacteurs à eau pressurisée qui sont composés de trois circuits principaux comme le montre la figure 1.1 :

1. Le circuit primaire traverse non seulement le coeur du réacteur mais aussi la partie primaire du générateur de vapeur. C'est dans le coeur que la chaleur est produite

1.1. FONCTIONNEMENT D'UNE CENTRALE NUCLÉAIRE ET EXPLOSION VAPEUR

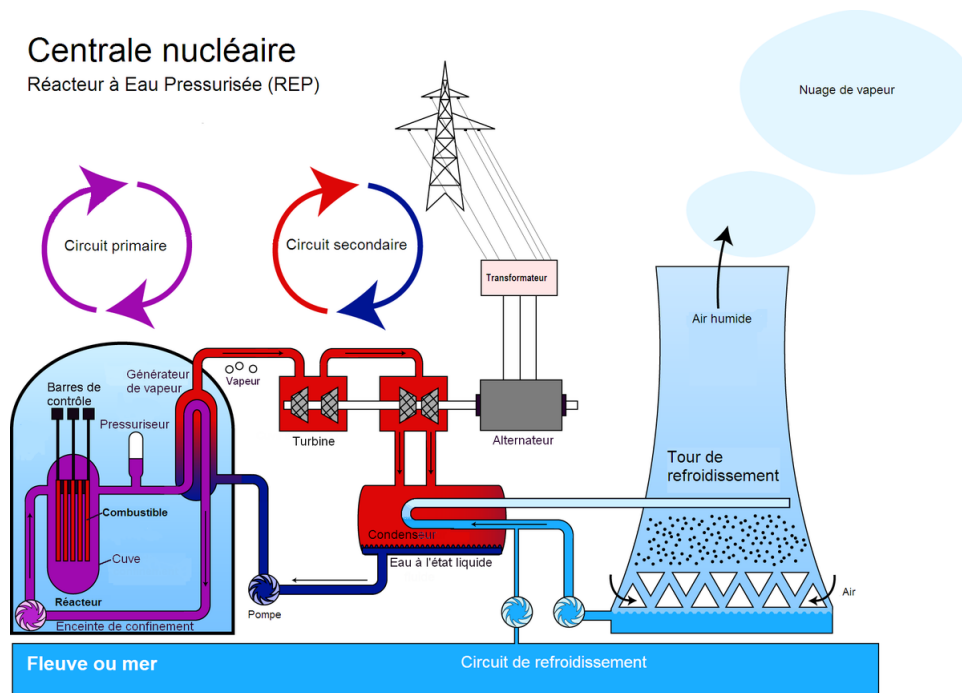


FIGURE 1.1 – Schéma de principe du fonctionnement d'une centrale nucléaire avec un réacteur à eau pressurisée.

grâce à des fissions.

2. Le circuit secondaire récupère la chaleur produite dans le circuit primaire grâce à des échanges thermiques. Cette chaleur est utilisée pour porter l'eau du circuit secondaire à ébullition au niveau d'un générateur de vapeur et, grâce à une turbine et un alternateur, produire de l'énergie. Remarquons qu'en fonctionnement normal, il n'y a pas d'échanges de fluides entre les circuits primaire et secondaire de manière à éviter toute contamination radioactive.
3. Le circuit tertiaire est la source froide de la machine thermique que constitue la centrale nucléaire.

1.1.2 Circuit primaire

C'est dans les crayons combustibles au contact du circuit primaire que se produisent les fissions qui dégagent une grande quantité de chaleur (pour mémoire un gramme d'Uranium équivaut à une tonne de pétrole). Le pressuriseur maintient l'eau du circuit primaire à une

1.1. FONCTIONNEMENT D'UNE CENTRALE NUCLÉAIRE ET EXPLOSION VAPEUR

pression adéquate de manière à ce qu'elle reste à l'état liquide. Le circuit primaire est composé de plusieurs éléments décrits ci-dessous.

La cuve est une enceinte étanche contenant le coeur du réacteur. C'est dans le coeur que les réactions s'effectuent grâce au combustible. De plus, des barres de contrôle y sont disposées pour contrôler la réaction en absorbant les neutrons. Dans la cuve, il y a un risque d'explosion vapeur.

Le fluide caloporteur permet d'évacuer du coeur du réacteur la chaleur produite par les fissions. Dans les centrales qui nous intéressent, le fluide caloporteur est de l'eau ordinaire. Celui-ci permet de transporter la chaleur au circuit secondaire.

Le pressuriseur permet de maintenir la pression de l'eau pour que celle-ci reste dans son état liquide.

1.1.3 Risque d'explosion vapeur

On peut recenser trois types d'explosion vapeur :

1. Le Borax qui est un accident de réactivité aboutissant à la fusion instantanée du combustible.
2. L'interaction Corium-eau en cuve.
3. La rupture de la cuve sous pression et l'éjection rapide du Corium qui va se déverser dans le puits de cuve.

Dans ces trois cas, du métal en fusion pourrait interagir avec de l'eau liquide et la vaporiser instantanément. Le choc induit par une explosion vapeur dépend évidemment de la quantité d'eau vaporisée. Les analyses de sûreté s'intéressent aux dégâts mécaniques causés par une telle explosion. Pourrait-elle aboutir à la rupture de l'enceinte ? Si c'est le cas, il y aurait contamination de l'environnement. L'agence de l'OCDE pour l'énergie nucléaire a mené une étude sur ce phénomène [Sairanen et al. 2007].

1.2 Simulation numérique

L'étude de ce phénomène peut se faire de deux manières. La première méthode est de procéder à des expériences. Nous pouvons citer l'expérience KROTOS menée au CEA de Cadarache, dont on peut retrouver le détail dans [Zabiego et al. 2010]. Précisons cependant que ce type d'expérience ne permet pas d'étudier tous les événements, même les plus hypothétiques, qui pourraient se produire dans le réacteur et que les exploitants étudient au titre de la défense en profondeur.

La seconde possibilité consiste à faire une étude purement numérique du problème. Dans ce cadre, la simulation numérique est un outil important. En effet, contrairement aux méthodes expérimentales, elle permet de prendre en compte tout type de scénario et n'a pas de problème lié à la reproductibilité de l'expérience. Cependant, effectuer des simulations numériques précises nécessite la construction de modèles et le développement d'algorithmes robustes pour résoudre le problème considéré. Actuellement, l'étude de l'explosion vapeur s'effectue, en France, grâce au code de calcul MC3D [Brayer et Berthoud 1998]. Cet outil est un code de calcul ayant une approche Eulérienne et utilisant des méthodes de type volumes finis et différences finies.

Dans cette thèse, nous allons étudier ce que peut apporter une nouvelle approche de ce problème. Le modèle considéré sera basé sur les équations d'Euler bifluide avec une approche Lagrangienne. Au lieu d'observer des volumes fixes, nous observons un volume qui suit le fluide au cours du temps. Lorsqu'il n'y a pas de changement de phase, cela permet de distinguer la phase liquide de la phase vapeur de l'eau contrairement à la description Eulérienne. L'approche numérique sera basée sur des méthodes de type volumes finis avec des flux nodaux développées par Després et Mazeran [2005] et Maire et al. [2007].

1.3 Plan de thèse

Cette thèse se compose de cinq chapitres. Nous expliquons ici le but de chaque chapitre.

Chapitre 1 : Nous y expliquons d'où viennent les équations d'Euler en se basant sur les principes de base de la mécanique des milieux continus et de la thermodynamique. Ce

chapitre nous permet aussi de mettre en avant les liens et les différences entre les descriptions Lagrangienne et Eulérienne. Ce chapitre est essentiellement basé sur les travaux de [Serrin 1959; Maire 2011; Despres 2010; Temam et Miranville 2005]. Nous rappelons aussi les principes thermodynamiques fondamentaux et l'expression nécessaire d'une loi d'état qui permet notamment de définir la pression en fonction des autres variables thermodynamiques. Ce chapitre permet aussi de justifier le choix d'une description Lagrangienne pour l'étude de l'explosion vapeur plutôt que la classique description Eulérienne utilisée, par exemple, dans le code MC3D.

Chapitre 2 : Nous y faisons un rappel de deux algorithmes de type Godunov utilisant des flux nodaux pour l'hydrodynamique Lagrangienne : GLACE et EUCCLHYD. Ces deux schémas numériques ont été développés par Després et Mazeran [2005] pour GLACE et Maire et al. [2007] pour EUCCLHYD. Nous profitons de ce chapitre pour mettre en avant un léger défaut de ces deux schémas, qui, de par la dépendance de leurs solveurs nodaux à la longueur des mailles, peuvent amener à des vitesses nodales ayant une direction incorrecte. Nous expliquons avec cette remarque, ce qui nous a motivé dans le développement d'un nouveau schéma numérique grâce auquel nous obtenons une vitesse nodale ayant la bonne direction dans le cas de problèmes unidimensionnels.

Chapitre 3 : Dans le troisième chapitre, nous développons un nouveau solveur nodal. Nous construisons ce solveur en réutilisant les idées de Després et Mazeran [2005] avec un point de vue continu autour du noeud. Cela aboutit au développement d'un solveur nodal dépendant uniquement de la variation angulaire des variables physiques autour du noeud et non de longueurs caractéristiques des mailles voisines. Nous montrons que ce nouveau solveur nodal règle le problème exposé au chapitre 2. Nous montrons aussi que le schéma numérique qui découle de ce solveur vérifie une propriété de consistance faible en reprenant les idées de Després [2010] et que l'erreur de consistance dépend de l'impédance acoustique. Cependant, nous montrons que, contrairement à GLACE et EUCCLHYD, le schéma développé dans ce chapitre ne vérifie pas d'inégalité entropique. De manière à étudier ce problème et son influence dans le chapitre suivant, nous proposons la construction de schémas hybrides à la manière d'un θ -schéma. Finalement, une modification du solveur

nodal, prenant en compte le principe fondamental de la dynamique et justifiant la première forme de ce solveur, est explicitée.

Chapitre 4 : Celui-ci est essentiellement consacré à la validation numérique du nouveau schéma développé au chapitre précédent. Pour cela, nous regardons dans un premier temps des tests classiques unidimensionnels et bidimensionnels qui permettent de définir le domaine d'utilisation de notre schéma. On met notamment en avant que le schéma est très peu dissipatif, ce qui constitue un avantage dans certains cas. Cependant, on observe aussi de mauvais résultats sur d'autres cas (cas tests de Saltzman et Sedov). Sur ceux-ci, nous étudions la variation de l'entropie, ce qui permet de montrer que l'entropie donnée par notre schéma peut devenir décroissante. L'utilisation des schémas hybrides met en avant que ce n'est pas ce défaut d'entropie qui est responsable des mauvais résultats obtenus, mais le manque de dissipation du schéma. Finalement, une première application à l'explosion vapeur est faite. Celle-ci montre le très bon comportement de notre schéma sur ce type d'applications.

Chapitre 5 : Alors que le changement de phase a complètement été négligé dans les chapitres précédents, ce dernier s'intéresse à ce phénomène. En effet, l'explosion vapeur prend son origine dans un changement de phase brutal. Nous cherchons donc à modéliser ce phénomène, à mettre en avant les avantages qu'il y ait à l'intégrer dans le cadre d'une description Lagrangienne plutôt qu'Eulérienne, et à savoir si il peut intervenir dans l'explosion vapeur après que le premier changement de phase brutal se soit produit.

Chapitre 2

Hydrodynamique Lagrangienne et Eulérienne multidimensionnelle

Dans ce premier chapitre, nous rappelons plusieurs résultats généraux sur le modèle utilisé dans la suite de ce manuscrit. Dans un premier temps, nous nous intéressons aux principes de mécanique des fluides permettant d'obtenir les équations d'Euler. Deux possibilités s'offrent à nous pour décrire des problèmes de mécanique des fluides : la première est la description Lagrangienne, la seconde la description Eulérienne. La description Lagrangienne consiste à suivre des particules de fluides au cours du temps alors que l'Eulérienne consiste à observer un volume fixe dans lequel le fluide évolue. Ce premier chapitre nous permet d'explicitier ces deux méthodes dans leur différence d'approches, mais aussi d'analyser le lien entre les deux. Cette partie est basée sur les résultats exposés dans les références suivantes [Serrin 1959; Maire 2011; Despres 2010; Temam et Miranville 2005].

Dans un deuxième temps, quelques principes de thermodynamique sont rappelés. Nous nous intéressons notamment aux deux premiers principes fondamentaux de la thermodynamique. Nous rappelons aussi la loi d'état de type *stiffened gas*.

2.1 Cinématique d'un fluide

2.1.1 Description Eulérienne et Lagrangienne

Soit \mathbb{R}^d l'espace Euclidien de dimension d où d est un entier pouvant prendre pour valeur 1, 2 ou 3. On munit cet espace de sa base orthonormale canonique. Notons $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ le vecteur position associé à cette base. Considérons \mathcal{D} une région de \mathbb{R}^d initialement remplie d'un fluide en mouvement. Mathématiquement l'évolution de ce fluide peut être décrite par une transformation continue ϕ de \mathcal{D} dans $\mathcal{D}(t)$

$$\phi : \mathbf{X} \rightarrow \mathbf{x} = \phi(\mathbf{X}, t). \quad (2.1)$$

Ici t est un réel positif représentant le temps et $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}$ est la position initiale d'une particule de fluide ayant pour position \mathbf{x} au temps $t > 0$. L'écoulement du fluide est alors complètement décrit par cette application $\mathbf{x} = \phi(\mathbf{X}, t)$. Remarquons que par définition on a $\mathbf{X} = \phi(\mathbf{X}, 0)$. De plus, on suppose que deux particules initialement distinctes le resteront au cours du mouvement du fluide. Cette hypothèse implique que l'application ϕ est inversible. Supposons de plus que l'application ϕ possède des dérivées continues jusqu'à l'ordre 3, excepté, potentiellement, sur certaines surfaces ou courbes singulières.

Considérons $\omega(t)$ un sous-domaine de \mathcal{D} en mouvement. Alors ω peut être vu comme un sous domaine Ω de \mathcal{D} via ϕ , c'est-à-dire,

$$\omega(t) = \{\mathbf{x} = \phi(\mathbf{X}, t), \mathbf{X} \in \Omega\}. \quad (2.2)$$

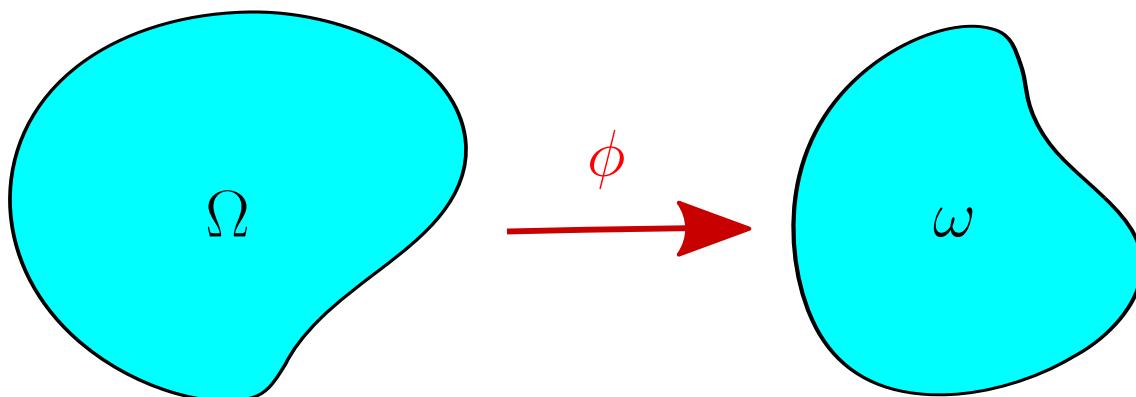


FIGURE 2.1 – Notations.

2.1. CINÉMATIQUE D'UN FLUIDE

Dans la suite on notera $\partial\omega$ (resp $\partial\Omega$) la frontière de ω (resp Ω). On définit la normale extérieure à $\partial\omega$ (resp $\partial\Omega$) par \mathbf{n} (resp \mathbf{N}).

Explicitons maintenant les descriptions Eulérienne et Lagrangienne. Cette dernière, aussi appelée description matérielle, est basée sur l'observation de particules de fluides évoluant au cours du temps. En conséquence dans le cadre de cette description on utilisera les variables (\mathbf{X}, t) . La description Eulérienne quant à elle, est basée sur l'observation d'un volume fixe au cours du temps dans lequel le fluide est en mouvement. Dans ce cadre les variables (\mathbf{x}, t) seront utilisées.

Même si l'écoulement du fluide est à priori complètement déterminé par l'application (2.1), en général on s'intéresse à l'évolution de plusieurs autres propriétés physiques de ce fluide (pression, densité, énergie...). Considérons donc une fonction f représentant une variable physique du fluide en (\mathbf{x}, t) . On peut aussi exprimer f dans les coordonnées Lagrangienne, on peut donc écrire

$$f(\mathbf{x}, t) \text{ ou } f(\mathbf{X}, t). \quad (2.3)$$

En fait, $f(\mathbf{X}, t)$ est la valeur de f au temps t associée à la particule initialement située en \mathbf{X} . $f(\mathbf{x}, t)$ est la valeur de f associée à la particule située en \mathbf{x} au temps t .

Supposons maintenant que f soit suffisamment régulière de manière à pouvoir calculer sa dérivée première en coordonnées Lagrangienne et Eulérienne. On appelle dérivée matérielle

$$\frac{d}{dt}f = \frac{\partial}{\partial t}f(\mathbf{X}, t), \quad (2.4)$$

qui correspond à la dérivée en temps de f lorsqu'elle est exprimée en coordonnées Lagrangiennes. La vitesse d'une particule, donnée par

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \frac{d}{dt}\mathbf{x} = \frac{\partial}{\partial t}\phi, \quad (2.5)$$

est alors une fonction des coordonnées Lagrangiennes. Cependant il est possible de l'exprimer dans les coordonnées Eulériennes en résolvant le système d'équations différentielles ordinaires

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\mathbf{x} &= \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{x}(0) &= \mathbf{X}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

2.1. CINÉMATIQUE D'UN FLUIDE

Le système d'équations différentielles ordinaires (2.6) décrit la trajectoire des particules. On peut maintenant, en utilisant la règle de dérivation des fonctions composées, exprimer la dérivée matérielle d'une fonction f en coordonnées Eulériennes

$$\frac{d}{dt}f(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial}{\partial t}f + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}f, \quad (2.7)$$

où $\nabla_{\mathbf{x}}$ est le gradient en coordonnées Eulériennes. Il est possible d'obtenir un résultat similaire dans le cas où \mathbf{f} est à valeurs vectorielles. Il suffit dans ce cas, de faire les mêmes calculs pour chacune des composantes de \mathbf{f} . On obtient

$$\frac{d}{dt}\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{f} + (\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{f}) \mathbf{u}. \quad (2.8)$$

Notons F la matrice jacobienne associée à l'application ϕ

$$F = \nabla_{\mathbf{X}}\phi. \quad (2.9)$$

Les hypothèses faites sur ϕ impliquent que cette matrice soit inversible et que son déterminant J soit tel que

$$0 < J < +\infty. \quad (2.10)$$

En fait, J représente la dilatation infinitésimale du volume suivant le fluide. En effet, si dV désigne un volume élémentaire dans la description Lagrangienne, alors le volume élémentaire correspondant dans la description Eulérienne peut s'écrire

$$dv = JdV. \quad (2.11)$$

Déterminons maintenant la dérivée matérielle de J .

$$\frac{d}{dt}J = \frac{\partial}{\partial F}(det F) : \frac{d}{dt}F.$$

Or, on sait que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}F &= \frac{d}{dt}\nabla_{\mathbf{X}}\mathbf{x}, \\ &= \nabla_{\mathbf{X}}\mathbf{u}, \\ &= (\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u})(\nabla_{\mathbf{X}}\mathbf{x}), \\ &= (\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u})F. \end{aligned}$$

D'où, en utilisant des relations de l'annexe A, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}J &= (det F)F^{-t} : (\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u})F, \\ &= JF^{-t}F^t : \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u}, && \text{avec (A.6)} \\ &= Jtr(\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u}), && \text{avec (A.5)}. \end{aligned}$$

Donc

$$\frac{d}{dt}J = J\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u}. \quad (2.12)$$

2.1.2 Formule de transport

Soit $\omega(t)$ un volume arbitraire en mouvement. Soit $f(\mathbf{x}, t)$ une fonction scalaire représentant une variable physique du fluide. On cherche à déterminer

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} f(\mathbf{x}, t) dv. \quad (2.13)$$

Considérons dans un premier temps que le volume ω choisi soit une portion de fluide et donc bouge à la vitesse du fluide \mathbf{u} . Supposons que f soit de classe \mathcal{C}^1 . On remarque que

$$\int_{\omega} f(\mathbf{x}, t) dv = \int_{\Omega} f(\mathbf{X}, t) J dV. \quad (2.14)$$

Alors (2.13) devient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\omega} f(\mathbf{x}, t) dv &= \int_{\Omega} \left(J \frac{d}{dt} f + f \frac{d}{dt} J \right) dV \\ &= \int_{\Omega} \left(\frac{d}{dt} f + f \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} \right) J dV \quad \text{en utilisant (2.12)} \\ &= \int_{\omega} \left(\frac{d}{dt} f + f \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} \right) dv \quad \text{avec (2.11)}. \end{aligned}$$

En remplaçant la dérivée matérielle on obtient la formule de transport de Reynolds

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} f(\mathbf{x}, t) dv = \int_{\omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} f + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f \mathbf{u}) \right) dv. \quad (2.15)$$

En appliquant le théorème de divergence (A.8), cette formule peut aussi s'écrire

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} f(\mathbf{x}, t) dv = \int_{\omega} \frac{\partial}{\partial t} f dv + \int_{\partial\omega} f \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds. \quad (2.16)$$

Il est possible d'étendre la formule de Reynolds au cas où f est une fonction vectorielle.

Les premiers calculs restent identiques, ce qui nous donne

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\omega} \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) dv &= \int_{\omega} \left(\frac{d}{dt} \mathbf{f} + \mathbf{f} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} \right) dv \\ &= \int_{\omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f} + (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{f}) \cdot \mathbf{u} + \mathbf{f} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} \right) dv \quad \text{avec (2.8)} \end{aligned}$$

En utilisant la relation tensorielle (A.3) on a

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) dv = \int_{\omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{f} \otimes \mathbf{u}) \right) dv \quad (2.17)$$

où \otimes correspond au produit tensoriel définie en (A.1). Le théorème de divergence correspondant à ce cas (A.8) nous permet de conclure que

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) dv = \int_{\omega} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f} dv + \int_{\partial\omega} \mathbf{f} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dv. \quad (2.18)$$

2.1.3 Formule de Nanson et identité de Piola

On sait que les éléments de volume Eulériens et Lagrangiens sont liés par la relation $dv = JdV$. Dans cette partie on cherche le lien entre les éléments de surface des deux descriptions. Soit Ω un volume de fluide dans la configuration initiale et \mathbf{X} une particule de ce fluide située sur $\partial\Omega$. Notons dS l'élément de surface correspondant à cette particule, et \mathbf{N} la normale extérieure associée. De même, notons \mathbf{n} et ds la normale et l'élément de surface correspondant dans la description Eulérienne. On peut alors calculer dV avec

$$dV = d\mathbf{X} \cdot \mathbf{N}dS, \quad (2.19)$$

où $d\mathbf{X}$ représente un déplacement infinitésimal. Le volume infinitésimal correspond alors au cylindre basé sur la surface dS et le vecteur $d\mathbf{X}$. On peut, de la même manière écrire

$$dv = d\mathbf{x} \cdot \mathbf{n}ds. \quad (2.20)$$

D'autre part on sait que $dv = JdV$ et de la même manière on peut montrer que $d\mathbf{x} = Fd\mathbf{X}$, ce qui nous donne

$$J\mathbf{N}dS \cdot d\mathbf{X} = F^t \mathbf{n}ds \cdot d\mathbf{X}. \quad (2.21)$$

Ce résultat étant vrai pour tout déplacement élémentaire $d\mathbf{X}$ on en déduit la formule de Nanson :

$$\mathbf{n}ds = JF^{-t} \mathbf{N}dS. \quad (2.22)$$

De plus

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla_{\mathbf{X}} \cdot (JF^{-t}) dV &= \int_{\partial\Omega} JF^{-t} \mathbf{N}dS \\ &= \int_{\partial\omega} \mathbf{n}ds && \text{par(2.22)} \\ &= \int_{\omega} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot I_d dv \\ &= 0. \end{aligned}$$

Comme cette égalité est vraie pour tout sous domaine Ω , on obtient ainsi l'identité de Piola

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (JF^{-t}) = 0. \quad (2.23)$$

2.2 Les équations de conservation

2.2.1 Description Eulérienne et semi-Lagrangienne

Considérons ω un volume bougeant avec le fluide et $\partial\omega$ sa frontière. La première loi décrite est celle de la conservation de la masse, imposant que la masse du volume de fluide

2.2. LES ÉQUATIONS DE CONSERVATION

doit être constante. Ce qui peut être écrit

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho(\mathbf{x}, t) dv = 0, \quad (2.24)$$

où ρ correspond à la densité du fluide.

La seconde loi provient de la deuxième loi de Newton, qui nous dit que, la dérivée de la quantité de mouvement est égale à la résultante des forces qui s'appliquent sur le volume de fluide

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho \mathbf{u} dv = \int_{\omega} \rho \mathbf{g} + \int_{\partial\omega} \boldsymbol{\tau} ds. \quad (2.25)$$

Où \mathbf{g} décrit une force par unité de masse de fluide, typiquement la gravité, et $\boldsymbol{\tau}$ décrit une force par unité de surface agissant sur la frontière, typiquement les forces résultantes de la pression. Celle-ci peut s'écrire

$$\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t, \mathbf{n}) = T\mathbf{n}, \quad (2.26)$$

où T est le tenseur des contraintes de Cauchy. On peut remarquer que, de manière à satisfaire le principe d'équilibre du moment angulaire, ce tenseur doit être symétrique : $T^t = T$. Enfin, on applique le principe de conservation de l'énergie, c'est-à-dire que, l'augmentation de l'énergie totale dans ω doit correspondre à l'énergie apportée par les forces extérieures, la conduction thermique au travers de sa frontière et un potentiel apport de chaleur au volume de fluide concerné.

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho E dv = \int_{\partial\omega} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u} ds - \int_{\partial\omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} + \int_{\omega} \rho (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + r) dv. \quad (2.27)$$

Ici E est l'énergie totale par unité de masse. De plus $\mathbf{q} = \mathbf{q}(\mathbf{x}, t)$ est le flux de chaleur, ce qui correspond à l'énergie transférée au travers de la surface au bord de ω . Finalement r est la chaleur par unité de masse apportée par une source extérieure. L'égalité (2.27) correspond à la première loi de la thermodynamique que nous rappellerons dans la partie 2.3.1.

On peut aussi compléter les trois égalités (2.24,2.25,2.27) par la loi de conservation géométrique. Celle-ci régit la déformation du volume du fluide

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\omega} dv &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega} J dV, \\ &= \int_{\omega} \nabla \cdot \mathbf{u} dv. \end{aligned}$$

2.2. LES ÉQUATIONS DE CONSERVATION

En appliquant le théorème de divergence on obtient la loi de conservation géométrique

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} dv = \int_{\partial\omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds. \quad (2.28)$$

On peut finalement résumer les calculs précédents par le système d'équations suivant

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho dv &= 0, \\ \frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho \mathbf{u} dv - \int_{\partial\omega} T \mathbf{n} ds &= \int_{\omega} \rho \mathbf{g} dv, \\ \frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho E dv - \int_{\partial\omega} T \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds + \int_{\partial\omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} ds &= \int_{\omega} \rho (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + r) dv, \\ \frac{d}{dt} \int_{\omega} dv - \int_{\partial\omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds &= 0. \end{aligned} \quad (2.29)$$

On appelle cette description semi-Lagrangienne, car elle utilise la dérivée matérielle mais la représentation spatiale reste Eulérienne.

Supposons que les fonctions soient suffisamment régulières. En utilisant les formules de transport (2.15) et (2.17) on peut mettre le système (2.29) sous une forme Eulérienne

$$\begin{aligned} \int_{\omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] dv &= 0, \\ \int_{\omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \right] dv - \int_{\partial\omega} T \mathbf{n} ds &= \int_{\omega} \rho \mathbf{g} dv, \\ \int_{\omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) \right] dv - \int_{\partial\omega} T \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds + \int_{\partial\omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} ds &= \int_{\omega} \rho (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + r) dv. \end{aligned} \quad (2.30)$$

En utilisant les théorèmes de divergence (A.8) et (A.7), de l'annexe A, sur les intégrales de surface on obtient

$$\begin{aligned} \int_{\omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] dv &= 0, \\ \int_{\omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \nabla \cdot T \right] dv &= \int_{\omega} \rho \mathbf{g} dv, \\ \int_{\omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) - \nabla \cdot (T \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{q} \right] dv &= \int_{\omega} \rho (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + r) dv. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Ce système correspond à la description Eulérienne écrite sous forme intégrale. Néanmoins ce résultat est valable pour tout volume ω . On peut donc en déduire une forme locale

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \nabla \cdot T &= \rho \mathbf{g}, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) - \nabla \cdot (T \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{q} &= \rho (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + r). \end{aligned} \quad (2.32)$$

2.2.2 Description Lagrangienne

Pour compléter la description du modèle physique, nous explicitons dans cette partie la description Lagrangienne et son lien avec les descriptions précédentes. Il est clair qu'on peut facilement obtenir une forme intégrale en effectuant le changement de variable adéquat

dans (2.29)

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho J dV &= 0, \\
 \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho J \mathbf{u} dV - \int_{\partial\Omega} J T F^{-t} \mathbf{N} dS &= \int_{\Omega} \rho J \mathbf{g} dV, \\
 \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho J E dV - \int_{\partial\Omega} J T \mathbf{u} \cdot F^{-t} \mathbf{N} + J \mathbf{q} \cdot F^{-t} \mathbf{N} dS &= \int_{\Omega} \rho J (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + r) dV, \\
 \frac{d}{dt} \int_{\Omega} J dV - \int_{\partial\Omega} J \mathbf{u} \cdot F^{-t} \mathbf{N} dS &= 0.
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

Par la suite on veut obtenir la forme locale des équations dans le cadre Lagrangien. En appliquant les théorèmes de divergence adéquats à la formulation intégrale (2.33) on obtient les relations suivantes

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho J dV &= 0, \\
 \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho J \mathbf{u} dV - \int_{\Omega} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J T F^{-t}) dV &= \int_{\Omega} \rho J \mathbf{g} dV, \\
 \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho J E dV - \int_{\Omega} [\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J F^{-1} T \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J F^{-1} \mathbf{q})] dV &= \int_{\Omega} \rho J (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + r) dV, \\
 \frac{d}{dt} \int_{\Omega} J dV - \int_{\Omega} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J F^{-1} \mathbf{u}) dV &= 0.
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

Ces équations étant valables pour tout sous-domaine Lagrangien Ω , on en déduit la formulation locale suivante

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} (\rho J) &= 0, \\
 \frac{d}{dt} (\rho J \mathbf{u}) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J T F^{-t}) &= \rho J \mathbf{g}, \\
 \frac{d}{dt} (\rho J E) - \nabla \cdot (J F^{-1} T \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J F^{-1} \mathbf{q}) &= \rho J (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + r), \\
 \frac{d}{dt} J - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J F^{-1} \mathbf{u}) &= 0.
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

Notons, en utilisant la première ligne de (2.35), $\rho_0 = \rho J$. Alors on peut réécrire le système sous la forme

$$\begin{aligned}
 \rho_0 \frac{d}{dt} \tau - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J F^{-1} \mathbf{u}) &= 0, \\
 \rho_0 \frac{d}{dt} (\rho \mathbf{u}) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J T F^{-t}) &= \rho_0 \mathbf{g}, \\
 \rho_0 \frac{d}{dt} (\rho E) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J F^{-1} T \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J F^{-1} \mathbf{q}) &= \rho_0 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + r),
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

où $\tau = \frac{1}{\rho}$.

2.2.3 Quelques remarques

Les résultats présentés ci-dessus sont ceux nécessaires à la compréhension de la suite de cette thèse. Cependant de nombreux résultats supplémentaires sont présentés dans [Maire 2011]. Dans cette partie nous nous contentons d'évoquer quelques résultats démontrés par Maire dans son habilitation à diriger des recherches. Pour une preuve de ceux-ci nous renvoyons le lecteur à son ouvrage.

2.2.3.1 Sur la description ALE

Dans les sections précédentes on a présenté les deux méthodes principales : les descriptions Eulérienne et Lagrangienne. La méthode Lagrangienne a l'avantage de suivre naturellement les interfaces entre différents fluides mais peut mener à d'importantes déformations du maillage. La seconde méthode, elle, utilise un maillage fixe. Cependant elle ne permet pas de suivre précisément et aisément les interfaces. Une autre description possible est l'ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) qui permet de bouger le maillage avec une vitesse fixée qui peut être différente de celle du fluide. Elle vise à utiliser les avantages de chacune des descriptions Eulérienne et Lagrangienne en les combinant. Dans la description ALE, les équations sont obtenues grâce à (A.20)

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho dv + \int_{\partial\omega} \rho (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} ds &= 0, \\
 \frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho \mathbf{u} dv - \int_{\partial\omega} T \mathbf{n} ds + \int_{\partial\omega} \rho \mathbf{u} (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} ds &= \int_{\omega} \rho \mathbf{g} dv, \\
 \frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho E dv - \int_{\partial\omega} (T \mathbf{u} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{n} ds + \int_{\partial\omega} \rho E (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} ds &= \int_{\omega} \rho (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + r) dv, \\
 \frac{d}{dt} \int_{\omega} dv - \int_{\partial\omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} ds &= 0,
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

où \mathbf{v} est un champ de vitesse caractérisant le mouvement du domaine, donc

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x} = \mathbf{v}. \tag{2.38}$$

2.2.3.2 Sur les relations de Rankine-Hugoniot

Les calculs précédents ne sont valables que pour des fonctions suffisamment régulières. Or, dans le cas de fonctions discontinues, ce sont les relations de Rankine-Hugoniot qui permettent de décrire l'évolution des discontinuités. Des méthodes similaires permettent d'obtenir ces relations pour chacune des descriptions présentées ici. L'obtention de ces relations se base essentiellement sur l'écriture d'une formule de transport dans le cas où les fonctions concernées ne sont que \mathcal{C}^1 par morceaux. Cette formule, sa preuve et l'obtention des formules de Rankine-Hugoniot à partir de celle-ci se trouvent dans [Maire 2011]. Nous nous contentons ici, pour compléter les résultats précédents, de rappeler les résultats obtenus dans cet ouvrage. On suppose donc maintenant que les variables physiques décrivant le fluide ne sont que \mathcal{C}^1 par morceaux et on note σ la surface de discontinuité.

Description Eulérienne Soit f une variable physique du fluide. On suppose que $\sigma = \omega_1 \cap \omega_2$ et que $\omega_1 \cup \omega_2 = \omega$. On note \mathbf{n}_σ la normale à σ pointant vers ω_2 . On suppose que f a une discontinuité en σ mais est suffisamment régulière ailleurs. On notera dans la suite \mathbf{x}_σ les points de σ et

$$[f] = f_2 - f_1, \quad (2.39)$$

où

$$\begin{aligned} f_1 &= \lim_{h \rightarrow 0^+} f(\mathbf{x}_\sigma - h\mathbf{n}_\sigma), \\ f_2 &= \lim_{h \rightarrow 0^+} f(\mathbf{x}_\sigma + h\mathbf{n}_\sigma). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Alors, en supposant que les termes sources \mathbf{g} et r sont eux réguliers sur tout le domaine, on a les relations de Rankine-Hugoniot

$$\begin{aligned} m[\tau] - [\mathbf{u}] \cdot \mathbf{n}_\sigma &= 0, \\ m[\mathbf{u}] - [T]\mathbf{n}_\sigma &= \mathbf{0}, \\ m[e] + [\mathbf{q}] \cdot \mathbf{n}_\sigma - \frac{T_1 + T_2}{2} [\mathbf{u}] \cdot \mathbf{n}_\sigma &= 0. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Où $e = E - \frac{|\mathbf{u}|^2}{2}$ est l'énergie interne, $m = \rho_1(\mathbf{u}_1 - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_\sigma = \rho_2(\mathbf{u}_2 - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_\sigma$ est un débit massique par unité de surface et \mathbf{w} est la vitesse de l'interface σ . De plus, on remarque que deux cas peuvent alors être distingués. Le premier cas, lorsque $m = 0$, correspond à une discontinuité de contact. Il n'y a alors pas d'échange de masse. Le second, $m \neq 0$, correspond lui à un choc.

Description Lagrangienne Considérons ici Ω un domaine Lagrangien coupé en deux sous-domaines Ω_1 et Ω_2 par une surface de discontinuité Σ . On note \mathbf{N}_Σ la normale à Σ pointant vers Ω_2 . On note \mathbf{W} la vitesse de la surface Σ . Dans ce cadre Lagrangien les relations de Rankine-Hugoniot obtenues sont

$$\begin{aligned} M[\tau] + [JF^{-1}\mathbf{u}] \cdot \mathbf{N}_\Sigma &= 0, \\ M[\mathbf{u}] + [JTF^{-t}]\mathbf{N}_\Sigma &= \mathbf{0}, \\ M[E] + [JF^{-1}(T\mathbf{u} - \mathbf{q})] \cdot \mathbf{N}_\Sigma &= 0. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Où $M = \rho_1 J_1 \mathbf{W} \cdot \mathbf{N}_\Sigma = \rho_2 J_2 \mathbf{W} \cdot \mathbf{N}_\Sigma$. On retrouve de nouveau le cas de la discontinuité de contact ($M = 0$) et du choc ($M \neq 0$).

2.2.3.3 Sur les conditions aux bords

Remarquons que les équations décrites ci-dessus seront en fait résolues, numériquement, sur des domaines bornés. Pour que le problème soit alors bien défini il est nécessaire de se

donner des conditions aux bords. Plusieurs conditions aux bords peuvent être envisagées. Cependant, nous ne traitons pas ce problème dans ce cadre et référons le lecteur intéressé à l'ouvrage de Dubois [2001].

2.2.4 Application aux équations d'Euler

Les équations d'Euler, aussi appelées équations de la dynamique des gaz, s'obtiennent en imposant $T = -pI_d$, $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ et $r = 0$ aux systèmes (2.32), (2.29), (2.33) et (2.36), où p correspond à la pression. Cela signifie qu'on s'intéresse à un fluide dans lequel la viscosité et les transferts thermiques sont négligés.

Description Eulérienne locale pour la dynamique des gaz

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p &= \rho \mathbf{g}, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho E \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (p \mathbf{u}) &= \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Description Semi-Lagrangienne intégrale pour la dynamique des gaz

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho dv &= 0, \\ \frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho \mathbf{u} dv + \int_{\partial \omega} p \mathbf{n} ds &= \int_{\omega} \rho \mathbf{g} dv, \\ \frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho E dv + \int_{\partial \omega} p \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds &= \int_{\omega} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} dv, \\ \frac{d}{dt} \int_{\omega} dv - \int_{\partial \omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds &= 0. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Description Lagrangienne intégrale pour la dynamique des gaz

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho J dV &= 0, \\ \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \mathbf{u} J dV + \int_{\partial \Omega} J p F^{-t} \mathbf{N} dS &= \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} J dV, \\ \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho E J dV + \int_{\partial \Omega} J p \mathbf{u} \cdot F^{-t} \mathbf{N} dS &= \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} J dV, \\ \frac{d}{dt} \int_{\Omega} J dV - \int_{\partial \Omega} J \mathbf{u} \cdot F^{-t} \mathbf{N} dS &= 0. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Description Lagrangienne locale pour la dynamique des gaz

$$\begin{aligned} \rho^0 \frac{d}{dt} \tau - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J F^{-1} \mathbf{u}) &= 0, \\ \rho^0 \frac{d}{dt} \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J p F^{-t}) &= \rho^0 \mathbf{g}, \\ \rho^0 \frac{d}{dt} E + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (J F^{-1} p \mathbf{u}) &= \rho^0 \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

où $\rho^0 = \rho J$ est une constante.

2.2.5 Choix de la description

La description Eulérienne est la plus simple à mettre en oeuvre. Elle ne demande que l'utilisation d'un maillage fixe et la construction de schémas numériques de type Godunov se fait simplement avec l'utilisation du problème de Riemann qui peut être résolu complètement en une dimension d'espace. Cependant, rappelons que notre objectif est l'étude de problèmes multi-fluides. Or, lors de l'application à la description de deux fluides il faut ajouter une équation sur la fraction volumique d'un des fluides. En notant z la fraction volumique du premier fluide, les équations deviennent

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho z) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{u} z) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p &= \rho \mathbf{g}, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho E \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (p \mathbf{u}) &= \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}. \end{aligned} \tag{2.47}$$

Remarquons que la fraction volumique z est alors simplement transportée à la vitesse du fluide. Cela implique que, si les deux fluides sont initialement distincts, ils doivent le rester au cours du mouvement. Cependant, la diffusion numérique inhérente à tout schéma entraîne l'apparition d'une zone de mélange. Il faut alors traiter des zones où les deux fluides sont présents, et donc définir une équation d'état (voir section 2.3.3) adaptée à cette zone. Or, la construction d'une telle équation d'état peut être compliquée et demande à être traitée précisément. Sinon, cela peut entraîner l'apparition d'oscillations à l'interface, voire des pertes d'hyperbolicités dans le cas où l'on considère une équation d'état de type *stiffened gas* [Jung 2013]. Nous avons donc décidé, dans le cadre de cette thèse, de nous intéresser à une description qui suit le fluide de manière à éviter l'apparition de cette zone de mélange et de conserver exactement les interfaces.

La description purement Lagrangienne a l'avantage d'éliminer complètement la zone de mélange numérique. Cependant, comme on peut le voir dans les équations (2.45) et (2.46), elles sont compliquées en dimension deux. Elles sont donc peu pratiques pour la discrétisation et peu propices au développement d'un schéma numérique adapté.

Pour les raisons exprimées ci-dessus nous considérons dans cet ouvrage, comme Maire [2011], la description semi-Lagrangienne exprimée par les équations (2.44). Celles-ci ont le mérite d'être simples et donc propices au développement d'un schéma numérique. De plus,

le transport de la fraction volumique se réduit dans ce cadre à la supposée constante au cours du temps et ne nécessite donc pas l'utilisation d'une équation supplémentaire. Toutefois, cette approche nécessite plus de travail d'un point de vue maillage que la description Eulérienne car celui-ci est amené à bouger à chaque pas de temps. Il est donc possible d'obtenir un maillage qui dégénère, ce qui amènerait donc à l'impossibilité de poursuivre les calculs.

2.3 Quelques résultats de thermodynamique

Nous rappelons dans cette partie quelques résultats de thermodynamique. Nous rappelons dans un premier temps le premier et le deuxième principe de la thermodynamique. Nous expliciterons ensuite une loi d'état particulière, dite *stiffened gas*. Les résultats présentés ici seront principalement utilisés dans le cadre de l'introduction du changement de phase dans notre modèle.

2.3.1 Premier principe de la thermodynamique

Dans cette sous-section et la suivante nous rappelons les deux principes fondamentaux de la thermodynamique. Pour plus de précisions sur ces principes, nous référons le lecteur intéressé à Groot et Mazur [2013]; Callen [1998].

Pour tout système thermodynamique, on peut introduire une fonction d'état appelée entropie, notée s . On peut à partir de cette entropie, du volume molaire τ et de l'énergie interne molaire e définir les variables thermodynamiques suivantes

$$(\tau, e) \rightarrow \begin{cases} \frac{1}{T} \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial s}{\partial e} \right|_{\tau}, \\ \frac{P}{T} \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_e, \\ h \stackrel{\text{def}}{=} e + P\tau, \\ g \stackrel{\text{def}}{=} h - Ts, \end{cases} \quad (2.48)$$

où T est la température, P la pression, h l'enthalpie et g l'enthalpie libre (ou potentiel de Gibbs). Ces définitions impliquent que

$$Tds = de + Pd\tau. \quad (2.49)$$

2.3. QUELQUES RÉSULTATS DE THERMODYNAMIQUE

Considérons maintenant un système subissant une transformation réversible. Le premier principe de la thermodynamique nous dit qu'au cours de cette transformation, la variation de l'énergie est égale à la quantité d'énergie échangée avec le milieu extérieur par transfert thermique δQ et mécanique δW , ce qu'on peut écrire

$$de = \delta Q + \delta W. \quad (2.50)$$

Remarquons que dans notre cas, le transfert mécanique se réduit au travail des forces de pressions, c'est-à-dire que $\delta W = -Pd\tau$. On obtient donc

$$de = \delta Q - Pd\tau. \quad (2.51)$$

En utilisant l'égalité (2.49) on obtient

$$ds = \frac{\delta Q}{T}. \quad (2.52)$$

2.3.2 Second principe de la thermodynamique

Le second principe de la thermodynamique nous dit que, pour toute transformation du système, la variation d'entropie peut s'écrire

$$ds = ds_{rev} + ds_{irr}, \quad (2.53)$$

où $ds_{rev} = \frac{\delta Q}{T}$, correspond aux échanges de chaleur avec l'extérieur, et $ds_{irr} \geq 0$ correspond à des transformations non réversibles.

2.3.3 Équation d'état

Les systèmes d'équations aux dérivées partielles présentés précédemment, et en particulier celui correspondant à la description semi-Lagrangienne (2.44), sont composés d'une inconnue de plus que d'équations. Il est donc connu qu'il est nécessaire de se donner une loi de fermeture. Celle-ci est généralement donnée par la loi d'état exprimant la pression en fonction des autres variables physiques

$$p : (\tau, e) \rightarrow p(\tau, e). \quad (2.54)$$

Cependant, une telle équation est dite "incomplète", c'est-à-dire qu'elle ne permet pas de définir toutes les variables thermodynamiques avec la seule connaissance de cette loi.

2.3. QUELQUES RÉSULTATS DE THERMODYNAMIQUE

Lorsque l'on considère uniquement le système (2.44) sans changement de phase, la donnée de la pression comme loi d'état est suffisante. Cependant, nous considérerons dans la suite les transferts de masses, et dans ce cadre, il est nécessaire de se donner une loi d'état dite "complète". Dans notre cas nous allons donc considérer l'entropie molaire

$$s : (\tau, e) \rightarrow s(\tau, e). \quad (2.55)$$

Dans cette thèse nous considérons des lois d'état de type *stiffened gas* qui, tout en ayant une formulation simple, contiennent les propriétés nécessaires à la modélisation des effets attractifs et répulsifs des gaz. Cette équation d'état s'écrit

$$s(\tau, e) = c_v \ln(e - q - \pi\tau) + c_v(\gamma - 1) \ln(\tau) + m \quad (2.56)$$

où c_v , γ , q , π et m sont des constantes traduisant les propriétés du fluide considéré. Pour plus d'informations sur ces constantes et les méthodes pour les obtenir nous référons le lecteur intéressé à Métayer et al. [2004b]. Nous précisons cependant qu'il est courant de supposer que c_v , $\gamma - 1$ et π sont positifs.

Comme expliqué ci-dessus, la donnée de l'entropie constitue une loi d'état complète, qui permet donc de définir les autres constantes thermodynamiques à partir de ses dérivées premières (2.48) [Callen 1998]. On peut alors définir la pression p nécessaire à la résolution de nos équations, mais aussi l'enthalpie h , la température T et le potentiel de Gibbs g qui auront leur importance lors de l'introduction du changement de phase.

$$(\tau, e) \rightarrow \begin{cases} T = \frac{e - q - \pi\tau}{c_v}, \\ P = \frac{e - q - \pi\tau}{\tau} (\gamma - 1) - \pi, \\ h = q + (e - q - \pi\tau) \gamma, \\ g = q + (e - q - \pi\tau) \left(\gamma - \frac{m}{c_v} - \ln((e - q - \pi\tau) \tau^{(\gamma-1)}) \right). \end{cases} \quad (2.57)$$

Pour avoir des températures positives il est nécessaire d'ajouter l'hypothèse

$$e - q - \pi\tau > 0. \quad (2.58)$$

Les égalités (2.57) peuvent s'inverser et se réécrire dans différents systèmes de coordonnées.

Nous nous contentons ici de rappeler les résultats (voir Faccanoni [2009] par exemple).

$$(\tau, s) \rightarrow \begin{cases} T = \frac{1}{c_v} \tau^{1-\gamma} \exp\left(\frac{s-m}{c_v}\right), \\ P = (\gamma - 1) \tau^{-\gamma} \exp\left(\frac{s-m}{c_v}\right) - \pi, \\ h = q + \gamma \tau^{1-\gamma} \exp\left(\frac{s-m}{c_v}\right), \\ g = q + \left(\gamma - \frac{s}{c_v}\right) \tau^{1-\gamma} \exp\left(\frac{s-m}{c_v}\right). \end{cases} \quad (2.59)$$

$$(P, T) \rightarrow \begin{cases} s = c_v \gamma \ln(T) - c_v (\gamma - 1) \ln(P + \pi) + m + c_v \gamma \ln(c_v) + c_v (\gamma - 1) \ln(\gamma - 1), \\ \tau = c_v (\gamma - 1) \frac{T}{P + \pi}, \\ e = c_v T \frac{P + \pi \gamma}{P + \pi} + q, \\ h = q + \gamma c_v T, \\ g = c_v T \left(\gamma - \ln \left((c_v T)^\gamma \left(\frac{\gamma - 1}{P + \pi} \right)^{\gamma - 1} \right) \right) - Tm + q. \end{cases} \quad (2.60)$$

Finalemment, en mécanique des fluides, et pour pouvoir construire des schémas numériques permettant de résoudre les équations présentées précédemment, le calcul de la vitesse du son est nécessaire. La vitesse du son dans le cadre d'une loi de type *stiffened gas* se calcule simplement

$$c^2(\tau, e) \stackrel{\text{def}}{=} \tau^2 \left(P \frac{\partial P}{\partial e} \Big|_{\tau} - \frac{\partial P}{\partial \tau} \Big|_e \right) = \gamma (P + \pi) \tau. \quad (2.61)$$

Remarque 1 *Le cas d'un gaz parfait correspond à fixer $\pi = q = m = 0$.*

Remarque 2 *Parfois on se donne un coefficient q' plutôt que m . Les deux coefficients sont liés par la relation*

$$m = q' - c_v \gamma \ln(c_v) - c_v (\gamma - 1) \ln(\gamma - 1). \quad (2.62)$$

Dans la suite de cette thèse, nous utiliserons indifféremment ces deux notations.

Chapitre 3

Schémas numériques existants

Dans ce chapitre on s'intéresse aux schémas numériques existants pour résoudre les équations semi-Lagrangiennes (2.44) obtenues au chapitre 1 que nous rappelons ci-dessous

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho dv &= 0, \\ \frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho \mathbf{u} dv + \int_{\partial\omega} p \mathbf{n} ds &= \int_{\omega} \rho \mathbf{g} dv, \\ \frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho E dv + \int_{\partial\omega} p \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds &= \int_{\omega} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} dv, \\ \frac{d}{dt} \int_{\omega} dv - \int_{\partial\omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds &= 0.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Plusieurs méthodes existent pour résoudre ce système. La méthode classique est de considérer des schémas aux différences finies où toutes les variables ne sont pas localisées au même endroit. La pression et l'énergie interne sont alors considérées aux centres des mailles, alors que la vitesse, quant à elle, est définie aux noeuds du maillage. Les vitesses nodales sont alors utilisées pour faire bouger le maillage qui suit le fluide au cours du temps. Cette méthode a été initialement proposée par VonNeumann et Richtmyer [1950]. Cependant, cette méthode nécessite l'introduction d'une viscosité artificielle de manière à bien capturer les chocs et éviter l'apparition d'oscillations détruisant complètement les solutions obtenues. Pour plus de précisions sur ces méthodes nous référons le lecteur à Benson [1992]; Caramana et al. [1998b]; Wilkins [1980]; Loubère et al. [2016].

Une autre possibilité est d'utiliser une approche éléments finis. Ces méthodes ne seront pas considérées dans ce travail et nous référons le lecteur intéressé à Scovazzi et al. [2008] et aux travaux menés sur les méthodes éléments finis d'ordre élevés pour l'hydrodynamique Lagrangienne dans le cadre du code BLAST [Dobrev et al. 2011, 2012].

Dans cette thèse, nous focaliserons notre intérêt sur les schémas de type volumes finis,

et plus particulièrement de type Godunov. Ces schémas sont centrés, ce qui signifie que toutes les variables physiques (densité, énergie et vitesse) sont colocalisées et plus précisément définies aux centres des mailles. Les schémas de type Godunov ont pour avantage de ne pas nécessiter l'introduction de viscosité artificielle car les chocs y sont capturés naturellement. On peut aussi souligner que ces schémas sont naturellement conservatifs, s'adaptent facilement aux descriptions ALE, et sont compatibles avec les méthodes de type AMR (adaptive mesh refinement).

Les schémas de type Godunov sont en général décrits en utilisant des flux centrés sur les arêtes, calculés grâce à la résolution d'un problème de Riemann exact ou approché entre les deux cellules adjacentes à cette arête [Toro 2013; Godlewski et Raviart 2013]. Le premier algorithme créé pour résoudre les équations sous forme semi-Lagrangienne, CAVEAT, utilisait d'ailleurs cette méthodologie [Addessio et al. 1986]. Cependant, la description Lagrangienne nous impose de faire bouger le maillage au cours du temps, et donc de définir des vitesses aux noeuds. Dans le cadre de flux définis au niveau des arêtes, il est alors nécessaire de définir les vitesses nodales en utilisant les vitesses définies sur les arêtes. Pour éviter ce problème, nous allons nous intéresser aux schémas de type Godunov utilisant des flux situés aux noeuds, ce qui définira naturellement les vitesses nodales. Il est alors nécessaire de construire un solveur nodal qui va nous permettre, à partir des cellules adjacentes à un noeud, de définir une vitesse et une pression à ce noeud. Le développement de ce type de schéma a été initié par Després et Mazeran [2005] avec le développement du schéma GLACE et poursuivi par Carré et al. [2009]. Puis, remarquant une importante sensibilité de ce schéma aux rapports d'aspect des mailles, Maire a introduit le schéma EUCCLHYD [Maire et al. 2007]. Ensuite, Burton et al. [2013] ont développé un schéma similaire. Ces schémas ont été étendus à l'ordre deux, à des espaces de dimension trois, améliorés en terme de préservation des symétries et utilisés dans le cadre de schémas ALE [Carré et al. 2009; Maire et al. 2008; Maire 2009; Burton et al. 2015; Cheng et Shu 2012, 2014b; Barlow et al. 2016]. Dans la suite, nous rappelons le fonctionnement de GLACE et EUCCLHYD. Nous donnerons leurs principales propriétés et expliquerons le problème qui nous a amené au développement d'un nouveau schéma.

Ajoutons aussi que, dans le cadre de cette thèse, seul un espace de dimension deux a

été considéré. Les deux schémas décrits dans ce chapitre le seront donc en dimension deux même si ceux-ci ont tous deux été étendus, par leurs auteurs, à des espaces de dimension trois.

3.1 GLACE

Nous présentons dans cette partie le schéma GLACE développé par Després et Mazeran [2005]; Carré et al. [2009]. L'idée générale du schéma est de résoudre des demi-problèmes de Riemann dans la direction de normales nodales à définir. Ces problèmes sont résolus grâce à une généralisation multidimensionnelle du solveur acoustique, qui a pour avantage d'être linéaire. Le solveur nodal développé pour ce schéma est donc lui même une généralisation multidimensionnelle du solveur acoustique.

3.1.1 Définitions

Dans un premier temps nous avons besoin d'introduire plusieurs définitions et notations. Nous allons décrire des schémas pouvant utiliser des maillages non structurés. Dans toute la suite, la lettre r fera référence aux noeuds du maillage alors que la lettre j fera référence aux cellules. Les indices $(.r$ et $.j$ par exemple) feront référence au maillage alors que les exposants (par exemple $.n$) feront, en général, référence au temps. Nous notons Ω_j la maille j et e ou (r, s) les arêtes, où, r et s sont les deux noeuds aux extrémités de l'arête. Nous définissons aussi les relations de voisinage suivantes.

Définition 1 *Soit j une cellule, r un noeud et e une arête. On note*

- $r \sim j$ si et seulement si r est un noeud de la cellule j ,
- $e \underset{e}{\sim} j$ si et seulement si e est une arête de la cellule j .

On note \mathbf{x}_r les coordonnées du noeud r et $t \rightarrow V_j(t)$ le volume de la maille j en fonction du temps. Remarquons qu'il est naturel de définir le volume comme une fonction des coordonnées des noeuds. En notant $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n, \dots)$ on a

$$V_j : \mathbf{x} \rightarrow V_j(\mathbf{x}). \tag{3.2}$$

En réalité, le volume ne dépend que des noeuds dont est composée la maille concernée et non de tous les noeuds du maillage. On peut alors, comme le remarquent Whalen [1996] et Caramana et al. [1998a], définir le gradient du volume par rapport à la position des noeuds

$$\mathbf{C}_{j,r} = \nabla_{\mathbf{x}_r} V_j. \quad (3.3)$$

Le point important pour la discrétisation des équations (3.1) est alors que la variation du volume au cours du temps peut s'écrire en fonction des vitesses des noeuds $\mathbf{u}_r = \dot{\mathbf{x}}_r$. En effet, en utilisant la règle de dérivation des applications composées, on obtient

$$\frac{d}{dt} V_j = \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r. \quad (3.4)$$

De plus, les $\mathbf{C}_{j,r}$ vérifient certaines propriétés.

Proposition 1 *Pour toute maille j on a*

$$\sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} = \mathbf{0}. \quad (3.5)$$

Pour tout noeud intérieur, c'est-à-dire pour tout noeud qui n'est pas sur la frontière du domaine, on a

$$\sum_{j \sim r} \mathbf{C}_{j,r} = \mathbf{0}. \quad (3.6)$$

Aussi, il est possible de donner des expressions explicites pour les $\mathbf{C}_{j,r}$.

Proposition 2 *Considérons un espace de dimension 2. Soit j une cellule et r un noeud. On note r_- et r_+ les deux noeuds de la cellule j qui forment une arête de la maille avec r . On suppose que les noeuds r_- , r et r_+ sont classés dans l'ordre trigonométrique. Alors*

$$\mathbf{C}_{j,r} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} y_{r_+} - y_{r_-} \\ x_{r_-} - x_{r_+} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Démonstration. Il est connu qu'en dimension deux le volume d'un polygone quelconque peut s'écrire

$$V_j = \sum_{r \sim j} \frac{x_r y_{r_+} - y_r x_{r_+}}{2}$$

ce qui donne le résultat. □

Remarque 3 Si on note $N_{j,(r-,r)}$ et $N_{j,(r,r+)}$ les normales extérieures aux arêtes $(r-,r)$ et $(r,r+)$ de la cellule j , dont les longueurs correspondent aux longueurs des arêtes (voir figure 3.1). Alors on a

$$C_{j,r} = \frac{N_{j,(r-,r)} + N_{j,(r,r+)}}{2}. \quad (3.8)$$

Il est donc clair que les $C_{j,r}$ jouent le rôle de “normales nodales”.

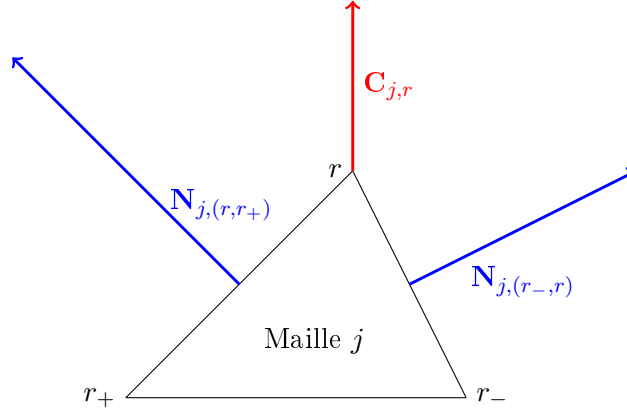


FIGURE 3.1 – Normale nodale.

3.1.2 Le schéma GLACE

3.1.2.1 Discrétisation des équations

Intéressons nous d’abord à la discrétisation spatiale des équations (3.1). La dérivée temporelle sera discrétisée ultérieurement en utilisant la méthode d’Euler à un pas. Remarquons que l’utilisation de la description Lagrangienne permet d’écrire la conservation de la masse sous la forme

$$\forall j, V_j(\mathbf{x}(t))\rho_j(t) = M_j, \quad (3.9)$$

où M_j est la masse supposée constante au cours du temps, de la cellule j . Alors en utilisant (3.4) on a

$$M_j \frac{d}{dt} \tau_j = \frac{d}{dt} V_j(\mathbf{x}) = \sum_{r \sim j} C_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r. \quad (3.10)$$

Ce qui correspond à la discrétisation de l’opérateur de divergence

$$\int_{\partial\Omega_j} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds \approx \sum_{r \sim j} C_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r. \quad (3.11)$$

On choisit alors, par analogie, de discrétiser $\int_{\partial\Omega_j} p\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds$ par

$$\int_{\partial\Omega_j} p\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds \approx \sum_{r \sim j} p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \quad (3.12)$$

où $p_{j,r}$ représente la pression appliquée par la cellule j au noeud r . Plus précisément, $p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r}$ est la force appliquée par la cellule j sur le noeud r . En se plaçant dans le cas où la vitesse \mathbf{u} est constante, on obtient la discrétisation du gradient de pression

$$\int_{\partial\Omega_j} p\mathbf{n} ds \approx \sum_{r \sim j} p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r}. \quad (3.13)$$

En résumant les discrétisations ci-dessus, notre schéma s'écrit sous la forme semi-discrète, dont on notera la simplicité,

$$\begin{aligned} M_j \frac{d}{dt} \tau_j &= \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r, \\ M_j \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j &= - \sum_{r \sim j} p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r}, \\ M_j \frac{d}{dt} E_j &= - \sum_{r \sim j} p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Remarque 4 *Il semblerait logique de ne vouloir définir qu'une seule pression par noeud. Cependant le développement de ce schéma a amené ses auteurs à considérer plusieurs pressions nodales. Dans le chapitre suivant, nous proposerons un nouveau solveur nodal qui définira une unique pression par noeud.*

Remarque 5 *La discrétisation (3.14) est en fait très proche des discrétisations volumes finis "classiques" dans lesquels les flux sont considérés au niveau des arêtes. L'utilisation des normales nodales $\mathbf{C}_{j,r}$ revient à imposer que vitesse et pression sont constantes sur chaque demi-arête (cf figure 3.2). Il est par ailleurs aussi possible de se ramener à une description utilisant des flux sur les arêtes*

$$\begin{aligned} M_j \frac{d}{dt} \tau_j &= \sum_{(r,s) \sim j} \mathbf{N}_{j,(r,s)} \cdot \left(\frac{\mathbf{u}_r + \mathbf{u}_s}{2} \right), \\ M_j \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j &= - \sum_{(r,s) \sim j} \frac{p_{j,r} + p_{j,s}}{2} \mathbf{N}_{j,(r,s)}, \\ M_j \frac{d}{dt} E_j &= - \sum_{(r,s) \sim j} \mathbf{N}_{j,(r,s)} \cdot \left(\frac{p_{j,r} \mathbf{u}_r + p_{j,s} \mathbf{u}_s}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Plus précisément, il est possible de passer des flux nodaux à des flux définis sur chaque arête, mais la réciproque n'est pas vraie.

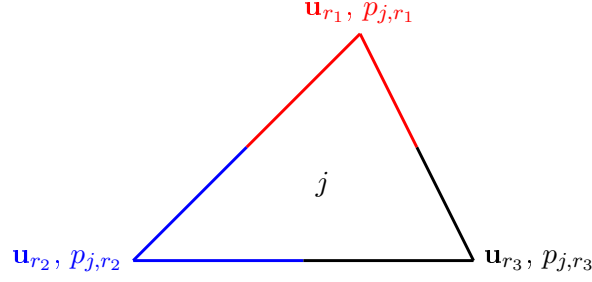


FIGURE 3.2 – Répartition des vitesses et pressions sur le contour de la cellule j .

3.1.2.2 Le solveur nodal

Décrivons maintenant comment obtenir les vitesses et pressions nodales qui apparaissent dans la discrétisation (3.14). Pour calculer ces vitesses et pressions, B.Després propose une généralisation du solveur acoustique [Godunov et al. 1976] au cas deux dimensionnel [Després et Mazeran 2005; Carré et al. 2009]. La première idée est de considérer des demi-problèmes de Riemann dans la direction des normales nodales $\mathbf{C}_{j,r}$, qu'on cherche à résoudre grâce à la généralisation du solveur acoustique.

$$p_j + \alpha_j \mathbf{u}_j \cdot \frac{\mathbf{C}_{j,r}}{|\mathbf{C}_{j,r}|} = p_{j,r} + \alpha_j \mathbf{u}_r \cdot \frac{\mathbf{C}_{j,r}}{|\mathbf{C}_{j,r}|}, \quad (3.16)$$

où $\alpha_j = \rho_j c_j$ est l'impédance acoustique, $c^2 = \left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_s$ est le carré de la vitesse du son et s est l'entropie. On a alors autant d'équations que de pressions nodales. Le système d'équations défini par ces relations est donc sous-déterminé. Il nous reste alors à définir deux équations de plus pour avoir un système ayant autant d'équations que d'inconnues. Dans ce but, il est usuel dans le cadre de l'étude de lois de conservations, de demander que le schéma soit conservatif.

Conservativité Supposons que la dérivée temporelle soit discrétisée grâce à la méthode d'Euler, le schéma sera conservatif en énergie totale et quantité de mouvement si et seulement si

$$\begin{aligned} \sum_j M_j \frac{\mathbf{u}_j^{n+1} - \mathbf{u}_j^n}{\delta t^n} &= \mathbf{0}, \\ \sum_j M_j \frac{E_j^{n+1} - E_j^n}{\delta t^n} &= 0, \end{aligned} \quad (3.17)$$

où $t^{n+1} = t^n + \delta t^n$. Donc le schéma est conservatif si et seulement si

$$\begin{aligned} \sum_r \sum_{j \sim r} \mathbf{C}_{j,r} p_{j,r} &= \mathbf{0}, \\ \sum_r \left(\sum_{j \sim r} p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r} \right) \cdot \mathbf{u}_r &= 0. \end{aligned} \quad (3.18)$$

On en conclut qu'une condition suffisante pour que le schéma soit conservatif est

$$\sum_{j \sim r} p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r} = \mathbf{0}. \quad (3.19)$$

Remarque 6 Cette condition revient à imposer que la somme des “forces” de pression autour du noeud s'annule.

En ajoutant cette condition (3.19) à (3.16) on obtient un système linéaire ayant autant d'équations que d'inconnues.

Résolution du système linéaire En résumé le calcul des valeurs nodales se fait grâce aux relations

$$\begin{aligned} p_j + \alpha_j \mathbf{u}_j \cdot \frac{\mathbf{C}_{j,r}}{|\mathbf{C}_{j,r}|} &= p_{j,r} + \alpha_j \mathbf{u}_r \cdot \frac{\mathbf{C}_{j,r}}{|\mathbf{C}_{j,r}|}, \\ \sum_{j \sim r} p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r} &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Ce système linéaire peut s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} A_r \mathbf{u}_r &= \mathbf{B}_r, \\ p_{j,r} &= p_j + \alpha_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_r) \cdot \frac{\mathbf{C}_{j,r}}{|\mathbf{C}_{j,r}|}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

avec

$$\begin{aligned} A_r &= \sum_{j \sim r} \alpha_j \frac{\mathbf{C}_{j,r} \otimes \mathbf{C}_{j,r}}{|\mathbf{C}_{j,r}|}, \\ \mathbf{B}_r &= \sum_{j \sim r} \left[p_j \mathbf{C}_{j,r} + \alpha_j \frac{\mathbf{C}_{j,r} \otimes \mathbf{C}_{j,r}}{|\mathbf{C}_{j,r}|} \mathbf{u}_j \right]. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Proposition 3 La matrice A_r définie dans (3.22) est définie positive.

Démonstration. Soit $r \in \mathbb{N}$ et $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^2$. Alors

$$\mathbf{u} \cdot A_r \mathbf{u} = \sum_{j \sim r} \alpha_j \frac{(\mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u})^2}{|\mathbf{C}_{j,r}|} \geq 0.$$

3.1. GLACE

Donc A_r est positive. De plus

$$\mathbf{u} \cdot A_r \mathbf{u} = 0 \Rightarrow \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \forall j \sim r.$$

Il est alors suffisant, pour conclure la preuve, de remarquer que les $\mathbf{C}_{j,r}$ forment une famille génératrice de \mathbb{R}^2 . Or cela est vérifié dès lors que le maillage n'est pas dégénéré. \square

Le système défini par (3.21) et (3.22) admet donc bien une unique solution, et le solveur nodal présenté ici est bien défini.

Remarque 7 *Pour que la proposition ne soit pas vérifiée, il faut que les $(\mathbf{C}_{j,r})_{j \sim r}$ ne forment pas une famille génératrice. Cela se produit pour les noeuds situés au coin du maillage, lorsque le noeud n'a qu'une seule cellule voisine. Un traitement particulier de conditions aux bords est alors nécessaire et sera détaillé dans la suite.*

3.1.2.3 Conditions aux bords

Le schéma utilisant un solveur nodal, les conditions aux bords demandent un traitement spécifique. Nous allons considérer trois types de conditions aux bords. Une vitesse de bord imposée, le mur glissant, ce qui veut dire que la vitesse normale est imposée comme étant nulle, et une pression extérieure imposée.

Vitesse imposée Considérons un noeud r situé sur le bord du domaine. Imposer la vitesse du bord revient à imposer la vitesse du noeud. On impose donc simplement

$$\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_{impose}. \quad (3.23)$$

Puis les pressions nodales sont calculées avec

$$p_{j,r} = p_j + \alpha_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_r) \cdot \frac{\mathbf{C}_{j,r}}{|\mathbf{C}_{j,r}|}. \quad (3.24)$$

Mur glissant Soit r un noeud situé sur le bord du domaine. Supposons que ce bord soit un mur, c'est-à-dire qu'on souhaite que la composante de la vitesse normale au bord soit nulle alors que la composante tangentielle peut être non nulle (les glissements sont

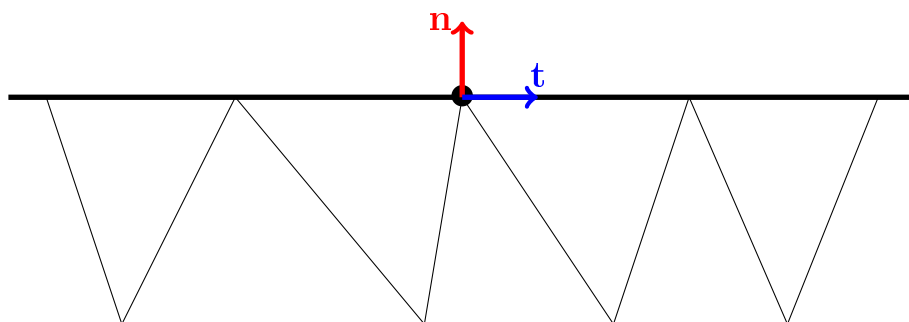


FIGURE 3.3 – Mur glissant.

autorisés). Pour cela, on définit, comme dans la figure 3.3, la normale \mathbf{n} et la tangente \mathbf{t} à la paroi au niveau du noeud considéré. On veut imposer

$$\mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (3.25)$$

Or cette condition n'est pas directement compatible avec le solveur nodal (3.20) car cela amène à un système sur-déterminé. Pour éviter ce problème, on réduit la seconde égalité de (3.20) à sa projection le long de la tangente, ce qui nous donne,

$$\begin{aligned} p_j + \alpha_j \mathbf{u}_j \cdot \frac{\mathbf{C}_{j,r}}{|\mathbf{C}_{j,r}|} &= p_{j,r} + \alpha_j \mathbf{u}_r \cdot \frac{\mathbf{C}_{j,r}}{|\mathbf{C}_{j,r}|}, \\ \left(\sum_{j \sim r} p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r} \right) \cdot \mathbf{t} &= 0, \\ \mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n} &= 0. \end{aligned} \quad (3.26)$$

On obtient alors un nouveau système linéaire qu'il est possible de résoudre exactement.

Proposition 4 *Considérons les matrices A_r et B_r définies par (3.22). Définissons*

$$\begin{aligned} \tilde{A}_r &= (I - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) A_r (I - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \text{tr}(A_r) \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \\ \tilde{B}_r &= (I - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) B_r, \end{aligned} \quad (3.27)$$

où I représente ici la matrice identité. Soit \mathbf{u}_r une solution du système linéaire défini par les matrices \tilde{A}_r et \tilde{B}_r . Alors \mathbf{u}_r est solution du système linéaire défini en (3.26).

Démonstration. Soit \mathbf{u}_r une solution du système linéaire

$$\tilde{A}_r \mathbf{u}_r = \tilde{B}_r. \quad (3.28)$$

Remarquons d'abord que $(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \mathbf{n} = \mathbf{n}$. Prenons alors le produit scalaire de (3.28) avec \mathbf{n} . En remarquant que $I - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ et \tilde{A}_r sont symétriques, on obtient

$$\text{tr}(A_r) \mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n} = 0.$$

3.1. GLACE

Il suffit de montrer que $\text{tr}(A_r) \neq 0$ pour prouver que \mathbf{u}_r vérifie la première égalité de (3.26). Or on a vu précédemment que A_r est définie positive, ce qui conclut cette première partie.

Remarquons de plus que $(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \mathbf{t} = 0$. En prenant le produit scalaire de (3.28) avec \mathbf{t} on obtient

$$(A_r \mathbf{u}_r) \cdot \mathbf{t} = \mathbf{B}_r \cdot \mathbf{t},$$

ce qui conclut la preuve. □

Pression extérieure imposée Considérons maintenant le cas où la pression à l'extérieur du domaine est imposée (cf figure 3.4). L'expression du solveur nodal (3.19) imposant que la somme des forces autour du noeud s'annule devient alors

$$\sum_{j \sim r} p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r} - p_{ext} \sum_{j \sim r} \mathbf{C}_{j,r} = \mathbf{0}. \quad (3.29)$$

Il est alors clair qu'en modifiant le second membre \mathbf{B}_r de (3.22) avec (3.29), on peut calculer la vitesse nodale. Le calcul des pressions nodales se fait alors naturellement avec la seconde égalité de (3.21).

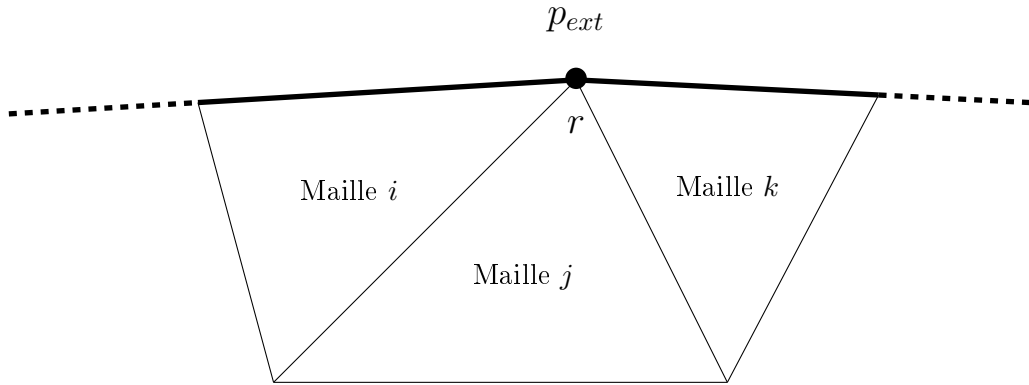


FIGURE 3.4 – Pression extérieure imposée.

3.1.3 Quelques propriétés du schéma

3.1.3.1 Conservativité

Proposition 5 *Le schéma GLACE décrit ci-dessus est conservatif en masse, quantité de mouvement et énergie totale.*

Démonstration. Cette proposition est un corollaire du paragraphe traitant de la conservativité de la section 3.1.2.2. □

3.1.3.2 Inégalité entropique

Proposition 6 *Le schéma GLACE sous forme semi-discrète est compatible avec l'inégalité entropique, c'est-à-dire que*

$$\forall j, \frac{d}{dt} s_j \geq 0. \quad (3.30)$$

Démonstration. En utilisant la relation fondamentale $Tds = de + Pd\tau$ et (3.14), on peut écrire pour toute cellule j ,

$$\begin{aligned} T_j \frac{d}{dt} s_j &= \frac{d}{dt} e_j + p_j \frac{d}{dt} \tau_j \\ &= \frac{d}{dt} E_j - \mathbf{u}_j \cdot \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j + p_j \frac{d}{dt} \tau_j. \end{aligned}$$

Donc

$$M_j T_j \frac{d}{dt} s_j = \sum_{r \sim j} [p_j \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r + p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_j - p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r].$$

De plus $\sum_{r \sim j} p_j \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_j = 0$. On a donc

$$\begin{aligned} M_j T_j \frac{d}{dt} s_j &= \sum_{r \sim j} (p_j - p_{j,r}) \mathbf{C}_{j,r} \cdot (\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_j) \\ &= \sum_{r \sim j} \frac{\alpha_j}{|\mathbf{C}_{j,r}|} (\mathbf{C}_{j,r} \cdot (\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_j))^2 \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

□

Cette relation permet d'assurer que le schéma capturera les solutions physiques. De plus, cela assure sa compatibilité avec les relations de Rankine Hugoniot sans aucun ajout de viscosité artificielle comme l'a montré LeVeque [1992].

3.1.3.3 Consistance faible

Théorème 1 *Le schéma GLACE est faiblement consistant.*

Ce théorème a été démontré par Després [2010]. Nous ne détaillons ici ni le théorème, ni la preuve et référons aux travaux de B.Després pour une preuve précise dans le cadre

de ce schéma numérique. En effet, nous démontrerons une partie de ce théorème pour le schéma numérique présenté au chapitre suivant et les preuves pour ces deux schémas sont similaires.

3.1.4 Remarque sur la mise à jour de la densité

Il existe en fait deux possibilités pour mettre à jour le volume massique. La première est d'utiliser la discrétisation de l'équation sur le volume massique

$$M_j \frac{d}{dt} \tau_j = \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r. \quad (3.31)$$

La seconde possibilité est d'utiliser la conservation de la masse. En effet, la description Lagrangienne implique naturellement que la masse des mailles M_j soit constante au cours du temps. On peut alors facilement recalculer la densité à l'instant t^{n+1} en la connaissant à l'instant t^n avec

$$\tau_j^{n+1} = \frac{V_j^{n+1}}{V_j^n} \tau_j^n. \quad (3.32)$$

Étudions la différence entre ces deux mises à jour de la densité. Plaçons nous dans le cadre d'un maillage général non structuré. Considérons une maille j définie par les noeuds $(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_J)$. On utilise ici une numérotation périodique, dans le sens où, $\mathbf{x}_{J+1} = \mathbf{x}_0$. Considérons les vitesses nodales associées à ces noeuds $(\mathbf{u}_r)_{r=0}^J$. On notera \mathbf{x}_r^n la position de ces noeuds à l'instant t^n et $\mathbf{x}_r^{n+1} = \mathbf{x}_r^n + \delta t \mathbf{u}_r$ leur position à l'instant $t^{n+1} = t^n + \delta t$. Supposons que le maillage ne soit pas dégénéré, dans le sens où l'on veut que le calcul des aires aux instant t^n et t^{n+1} puisse se faire avec la formule

$$V_j \left((\mathbf{x}_r)_{r=0}^J \right) = \frac{1}{2} \sum_{r=0}^J [x_r y_{r+1} - x_{r+1} y_r], \quad (3.33)$$

3.1. GLACE

où on a noté $\mathbf{x}_r = \begin{pmatrix} x_r \\ y_r \end{pmatrix}$. On note aussi, de la même manière, $\mathbf{u}_r = \begin{pmatrix} u_r \\ v_r \end{pmatrix}$. On peut alors calculer la surface de la maille à l'instant t^{n+1}

$$\begin{aligned}
V_j^{n+1} &= V_j \left((\mathbf{x}_r^{n+1})_{r=0}^J \right), \\
&= \frac{1}{2} \sum_{r=0}^J [x_r^{n+1} y_{r+1}^{n+1} - x_{r+1}^{n+1} y_r^{n+1}], \\
&= \frac{1}{2} \sum_{r=0}^J [(x_r^n + \delta t u_r) (y_{r+1}^n + \delta t v_{r+1}) - (x_{r+1}^n + \delta t u_{r+1}) (y_r^n + \delta t v_r)], \\
V_j^{n+1} &= \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{r=0}^J (x_r^n y_{r+1}^n - x_{r+1}^n y_r^n)}_{=V_j^n} + \underbrace{\frac{\delta t}{2} \sum_{r=0}^J [x_r^n v_{r+1} + u_r y_{r+1}^n - x_{r+1}^n v_r - y_r^n u_{r+1}]}_{C_1} + \\
&\quad + \underbrace{\frac{\delta t^2}{2} \sum_{r=0}^J [u_r v_{r+1} - u_{r+1} v_r]}_{C_2}.
\end{aligned}$$

Regardons d'abord C_1 . Pour cela, remarquons qu'en réordonnant la somme on peut écrire

$$\begin{aligned}
C_1 &= \frac{\delta t}{2} \sum_{r=0}^J \mathbf{u}_r \cdot \begin{pmatrix} y_{r+1}^n - y_{r-1}^n \\ x_{r-1}^n - x_{r+1}^n \end{pmatrix}, \\
C_1 &= \delta t \sum_{r=0}^J \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r.
\end{aligned}$$

D'autre part, on peut simplifier l'écriture de C_2

$$C_2 = \frac{\delta t^2}{2} \sum_{r=0}^J \mathbf{u}_r^\perp \cdot \mathbf{u}_{r+1},$$

avec $\mathbf{u}_r^\perp = \begin{pmatrix} -v_r \\ u_r \end{pmatrix}$. En utilisant les résultats précédents, en mettant à jour la densité avec la conservation de la masse, et en revenant à nos notations usuelles, on obtient

$$\tau_j^{n+1} = \tau_j^n + \frac{\delta t}{M_j} \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \mathbf{u}_r + \frac{\delta t^2}{2M_j} \sum_{r \sim j} \mathbf{u}_r^\perp \cdot \mathbf{u}_{r+1}. \quad (3.34)$$

En conclusion, utiliser la conservation de la masse (3.32) plutôt que la discrétisation (3.31) pour mettre à jour le volume massique ne rajoute qu'un terme d'ordre 2 en temps. Cela devrait donc donner des résultats similaires. C'est d'ailleurs ce qui se confirme d'un point de vue numérique.

Cependant, rappelons que notre objectif est l'étude de l'explosion vapeur. Dans ce cadre nous allons observer deux fluides en interaction. Assurer la conservation de la masse de chaque cellule assure qu'il n'y ait pas d'échanges de masses entre des fluides différents.

3.2. EUCCLHYD

Dans cette optique nous utiliserons toujours la conservation de la masse pour mettre à jour les volumes massiques.

3.1.5 Résumé

Nous présentons un résumé pour l'utilisation du schéma. Les étapes nécessaires à son utilisation sont les suivantes

1. Déterminer le pas de temps δt (voir la section 3.3).
2. Calculer les normales nodales $\mathbf{C}_{j,r}$.
3. Calculer les vitesses nodales \mathbf{u}_r et pressions nodales $p_{j,r}$ avec les relations (3.21).
4. Mettre à jour les vitesses et énergies totales au centre des mailles avec

$$\begin{aligned} M_j \frac{\mathbf{u}_j^{n+1} - \mathbf{u}_j^n}{\delta t} &= - \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} p_{j,r}, \\ M_j \frac{E_j^{n+1} - E_j^n}{\delta t} &= - \sum_{r \sim j} p_{j,r} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r. \end{aligned} \quad (3.35)$$

5. Mettre à jour la position des noeuds avec

$$\mathbf{x}_r^{n+1} = \mathbf{x}_r^n + \delta t \mathbf{u}_r. \quad (3.36)$$

6. Déterminer les volumes V_j^{n+1} et mettre à jour les volumes massiques avec la conservation de la masse

$$\tau_j^{n+1} = \frac{V_j^{n+1}}{V_j^n} \tau_j^n. \quad (3.37)$$

3.2 EUCCLHYD

Maire et al. [2007] mettent en évidence une forte dépendance de GLACE au rapport d'aspect des cellules. Dans l'optique de proposer une solution à ce problème P-H. Maire développe le schéma EUCCLHYD. L'idée de ces auteurs consiste simplement à résoudre des demi-problèmes de Riemann dans les directions des vecteurs normaux aux arêtes plutôt que de le faire dans les directions des normales nodales comme le propose B.Després dans GLACE. Les idées générales de GLACE sont donc réutilisées, et le solveur nodal développé pour EUCCLHYD est lui aussi une généralisation multidimensionnelle du solveur acoustique.

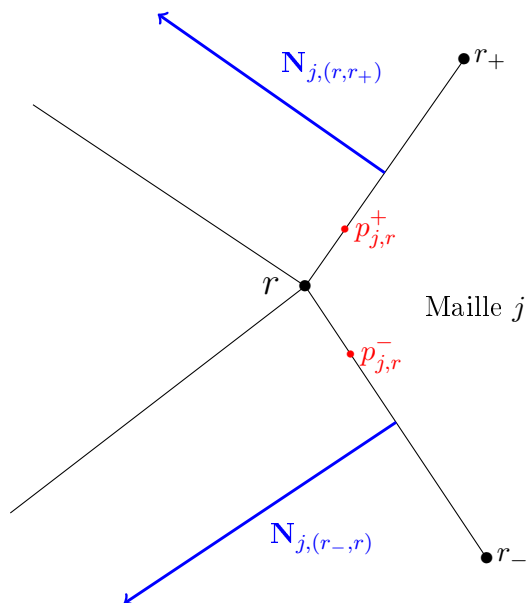


FIGURE 3.5 – Pressions nodales pour EUCCLHYD.

Dans cette partie nous rappelons le fonctionnement de ce schéma. Pour plus d'information le concernant nous référons donc le lecteur aux travaux de Maire et al. [2007]; Maire [2009]; Maire et Nkonga [2009].

3.2.1 Discrétisation des équations

Les équations sont discrétisées de la même manière que pour le schéma GLACE, mais deux pressions par noeud et par cellule sont considérées. De plus, les normales aux arêtes sont utilisées plutôt que les normales nodales.

$$\begin{aligned}
 M_j \frac{d}{dt} \tau_j &= \frac{1}{2} \sum_{r \sim j} [(\mathbf{N}_{j,(r-,r)} + \mathbf{N}_{j,(r,r+)}) \cdot \mathbf{u}_r], \\
 M_j \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j &= -\frac{1}{2} \sum_{r \sim j} [p_{j,r}^- \mathbf{N}_{j,(r-,r)} + p_{j,r}^+ \mathbf{N}_{j,(r,r+)}, \\
 M_j \frac{d}{dt} E_j &= -\frac{1}{2} \sum_{r \sim j} [(p_{j,r}^- \mathbf{N}_{j,(r-,r)} + p_{j,r}^+ \mathbf{N}_{j,(r,r+)}) \cdot \mathbf{u}_r],
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

où $\mathbf{N}_{j,(r-,r)}$ et $\mathbf{N}_{j,(r,r+)}$ correspondent aux normales des arêtes de la cellule j partant du noeud r (voire figure 3.5).

3.2.2 Le solveur nodal

Nous décrivons dans cette sous partie le solveur nodal du schéma EUCCLHYD permettant de calculer les vitesses et pressions nodales présentes dans la discrétisation (3.38). Les idées sont essentiellement similaires à celles utilisées pour le schéma GLACE, c'est-à-dire résoudre des demi-problèmes de Riemann grâce à la généralisation multidimensionnelle du solveur acoustique. Cependant, plutôt que de résoudre ces problèmes dans la direction des normales nodales, P-H.Maire propose de le faire en utilisant les directions des normales aux arêtes.

$$\begin{aligned} p_j + \alpha_j \mathbf{u}_j \cdot \frac{\mathbf{N}_{j,(r-,r)}}{|\mathbf{N}_{j,(r-,r)}|} &= p_{j,r}^- + \alpha_j \mathbf{u}_r \cdot \frac{\mathbf{N}_{j,(r-,r)}}{|\mathbf{N}_{j,(r-,r)}|}, \\ p_j + \alpha_j \mathbf{u}_j \cdot \frac{\mathbf{N}_{j,(r,r+)}}{|\mathbf{N}_{j,(r,r+)}|} &= p_{j,r}^+ + \alpha_j \mathbf{u}_r \cdot \frac{\mathbf{N}_{j,(r,r+)}}{|\mathbf{N}_{j,(r,r+)}|}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

De même qu'avec le schéma GLACE, ces relations ne sont pas suffisantes : elles nous donnent un système sous-déterminé. Pour obtenir les deux relations manquantes, P-H. Maire cherche la relation qui impose la conservativité du schéma. Dans le cadre de cette discrétisation, il est prouvé par Maire et al. [2007] qu'une condition suffisante de conservativité est

$$\sum_{j \sim r} \left[p_{j,r}^- \mathbf{N}_{j,(r-,r)} + p_{j,r}^+ \mathbf{N}_{j,(r,r+)} \right] = \mathbf{0}. \quad (3.40)$$

En injectant (3.39) dans (3.40), on se ramène à la résolution d'un système linéaire pour déterminer la vitesse nodale \mathbf{u}_r

$$\begin{aligned} A_r^E \mathbf{u}_r &= B_r^E, \\ A_r^E &= \sum_{j \sim r} \alpha_j \left[\frac{\mathbf{N}_{j,(r-,r)} \otimes \mathbf{N}_{j,(r-,r)}}{2|\mathbf{N}_{j,(r-,r)}|} + \frac{\mathbf{N}_{j,(r,r+)} \otimes \mathbf{N}_{j,(r,r+)}}{2|\mathbf{N}_{j,(r,r+)}|} \right], \\ B_r^E &= \sum_{j \sim r} \left[p_j \frac{\mathbf{N}_{j,(r-,r)} + \mathbf{N}_{j,(r,r+)}}{2} + \alpha_j \left(\frac{\mathbf{N}_{j,(r-,r)} \otimes \mathbf{N}_{j,(r-,r)}}{2|\mathbf{N}_{j,(r-,r)}|} + \frac{\mathbf{N}_{j,(r,r+)} \otimes \mathbf{N}_{j,(r,r+)}}{2|\mathbf{N}_{j,(r,r+)}|} \right) \mathbf{u}_j \right]. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Les pressions nodales sont elles calculées grâce à (3.39).

Proposition 7 *La matrice A_r définie dans (3.41) est symétrique, définie positive.*

Démonstration. La preuve repose essentiellement sur le fait que les sous matrices $\frac{\mathbf{N}_{j,(r-,r)} \otimes \mathbf{N}_{j,(r-,r)}}{2|\mathbf{N}_{j,(r-,r)}|} +$

3.2. EUCCLHYD

$\frac{\mathbf{N}_{j,(r,r_+)} \otimes \mathbf{N}_{j,(r,r_+)}}{2|\mathbf{N}_{j,(r,r_+)}|}$ sont elles même symétriques, définies positives. Maire [2009] en fait la preuve. \square

La proposition précédente nous assure que le système linéaire défini en (3.39) admet une unique solution.

Remarque 8 Maire [2009] propose de modifier l'impédance acoustique par des coefficients

$$\begin{aligned} z_{j,r}^- &= \alpha_j + \rho_j \Gamma_j \left| (\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_j) \cdot \frac{\mathbf{N}_{j,(r_-,r)}}{|\mathbf{N}_{j,(r_-,r)}|} \right|, \\ z_{j,r}^+ &= \alpha_j + \rho_j \Gamma_j \left| (\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_j) \cdot \frac{\mathbf{N}_{j,(r,r_+)}}{|\mathbf{N}_{j,(r,r_+)}|} \right|, \end{aligned} \quad (3.42)$$

comme le suggère lui même Dukowicz [1985]. Les relations (3.39) s'écrivent alors

$$\begin{aligned} p_j + z_{j,r}^- \mathbf{u}_j \cdot \frac{\mathbf{N}_{j,(r_-,r)}}{|\mathbf{N}_{j,(r_-,r)}|} &= p_{j,r}^- + z_{j,r}^- \mathbf{u}_r \cdot \frac{\mathbf{N}_{j,(r_-,r)}}{|\mathbf{N}_{j,(r_-,r)}|}, \\ p_j + z_{j,r}^+ \mathbf{u}_j \cdot \frac{\mathbf{N}_{j,(r,r_+)}}{|\mathbf{N}_{j,(r,r_+)}|} &= p_{j,r}^+ + z_{j,r}^+ \mathbf{u}_r \cdot \frac{\mathbf{N}_{j,(r,r_+)}}{|\mathbf{N}_{j,(r,r_+)}|}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Le système permettant de calculer la vitesse \mathbf{u}_r n'est alors plus linéaire, et une approche itérative est nécessaire pour en obtenir une solution approchée. Cependant, dans cette thèse, cette modification ne sera pas utilisée.

Remarque 9 La gestion des conditions aux bords est essentiellement similaire à celle décrite pour GLACE. Pour en avoir une description plus précise nous référons le lecteur aux travaux de Maire et al. [2007].

3.2.3 Résumé

Le schéma présenté ci-dessus peut alors se résumer simplement grâce aux étapes suivantes :

1. Déterminer le pas de temps δt (voir la section 3.3).
2. Calculer les normales $\mathbf{N}_{j,(r_-,r)}$ et $\mathbf{N}_{j,(r,r_+)}$.
3. Calculer les vitesse nodales \mathbf{u}_r avec (3.41) et pressions nodales $p_{j,r}^-$ et $p_{j,r}^+$ avec (3.39).

4. Mettre à jour les vitesses et énergies totales au centre des mailles avec

$$\begin{aligned} M_j \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j &= -\frac{1}{2} \sum_{r \sim j} \left[p_{j,r}^- \mathbf{N}_{j,(r-,r)} + p_{j,r}^+ \mathbf{N}_{j,(r,r+)} \right], \\ M_j \frac{d}{dt} E_j &= -\frac{1}{2} \sum_{r \sim j} \left[\left(p_{j,r}^- \mathbf{N}_{j,(r-,r)} + p_{j,r}^+ \mathbf{N}_{j,(r,r+)} \right) \cdot \mathbf{u}_r \right], \end{aligned} \quad (3.44)$$

5. Mettre à jour la position des noeuds avec

$$\mathbf{x}_r^{n+1} = \mathbf{x}_r^n + \delta t \mathbf{u}_r. \quad (3.45)$$

6. Déterminer les volumes V_j^{n+1} et mettre à jour le volume massique avec la conservation de la masse

$$\tau_j^{n+1} = \frac{V_j^{n+1}}{V_j^n} \tau_j^n. \quad (3.46)$$

3.2.4 Propriétés du schéma

3.2.4.1 Conservativité

Proposition 8 *Le schéma EUCCLHYD est conservatif en masse, quantité de mouvement et énergie totale.*

Démonstration. Cette propriété est en fait un corollaire de (3.40). □

3.2.4.2 Inégalité entropique

Proposition 9 *Le schéma EUCCLHYD sous forme semi-discrète est compatible avec l'inégalité entropique, c'est-à-dire que*

$$\forall j, \frac{d}{dt} s_j \geq 0. \quad (3.47)$$

La preuve est similaire à celle faite pour la proposition 6 pour l'inégalité entropique vérifiée par le schéma GLACE, et faite par Maire [2009]. Cependant nous nous servirons des résultats obtenus dans la preuve pour le développement de schémas hybrides à la partie 4.7. Rappelons donc brièvement la preuve proposée par Maire.

Démonstration. Rappelons que

$$T_j \frac{d}{dt} s_j = \frac{d}{dt} E_j - \mathbf{u}_j \cdot \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j + p_j \frac{d}{dt} \tau_j.$$

3.3. CALCUL DU PAS DE TEMPS

En utilisant (3.38) et (3.39) on obtient

$$M_j T_j \frac{d}{dt} s_j = \sum_r A_{j,r}^E (\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_j) \cdot (\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_j), \quad (3.48)$$

avec $A_{j,r}^E = \frac{\mathbf{N}_{j,(r-,r)} \otimes \mathbf{N}_{j,(r-,r)}}{2|\mathbf{N}_{j,(r-,r)}|} + \frac{\mathbf{N}_{j,(r,r+)} \otimes \mathbf{N}_{j,(r,r+)}}{2|\mathbf{N}_{j,(r,r+)}|}$. Or, les matrices $A_{j,r}^E$ sont symétriques définies positives. Donc

$$M_j T_j \frac{d}{dt} s_j \geq 0.$$

□

3.3 Calcul du pas de temps

3.3.1 Condition CFL

Les schémas numériques considérés dans cette thèse étant explicites en temps, une condition CFL est nécessaire. Cette condition s'écrit en général sous la forme

$$c_j \frac{\delta t}{\delta x_j} \leq C, \quad (3.49)$$

où nous rappelons que c_j correspond à la vitesse du son, C est une constante et δx_j correspond à une longueur caractéristique de la maille j . Toutefois, la définition de δx_j dans le cas général n'est pas évidente. En pratique, nous proposons deux possibilités pour définir cette distance caractéristique. La première consiste à dire que δx_j correspond à la distance minimale entre deux noeuds de la maille

$$\delta x_j = \min_{\substack{r, s \sim j \\ r \neq s}} (|\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_s|). \quad (3.50)$$

La seconde possibilité consiste à définir δx_j comme étant le diamètre du cercle inscrit dans la maille. De manière générale on prendra la constante C de l'ordre de 0.3. En effet les tests numériques effectués montrent qu'une telle limitation est à priori suffisante pour obtenir un schéma numérique stable.

3.3.2 Variation du volume

Il est aussi possible de limiter le pas de temps pour restreindre les variations du volume. Rappelons que $t^{n+1} = t^n + \delta t^n$. On souhaite alors imposer que

$$\frac{|V_j^{n+1} - V_j^n|}{V_j^n} \leq C_{vol}. \quad (3.51)$$

En utilisant une formule de Taylor à l'ordre un on peut écrire

$$V_j^{n+1} = V_j^n + \delta t^n \frac{d}{dt} V_j(t^n) \delta t^n. \quad (3.52)$$

En utilisant la relation (3.10), on obtient alors la condition

$$\delta t^n \frac{\left| \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \right|}{V_j^n} \leq C_{vol}. \quad (3.53)$$

Maire [2009] conseille de prendre $C_{vol} = 0.1$.

3.3.3 Limitation de la croissance du pas de temps

Finalement, dans certains cas, il peut être utile de limiter la croissance du pas de temps. C'est à dire imposer que

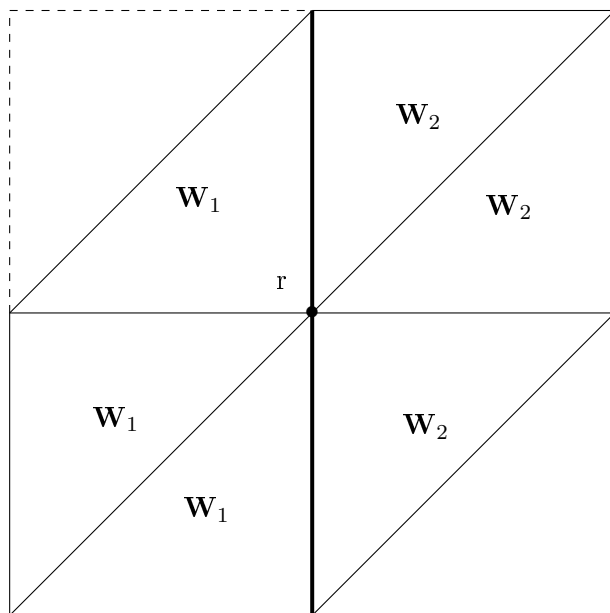
$$\delta t^n \leq C_t \delta t^{n-1}, \quad (3.54)$$

où $C_t \geq 1$. En règle général, il est suffisant de prendre $C_t = 1.01$.

En résumé, nous calculons le pas de temps en combinant ces trois limitations

$$\delta t^n = \min \left(C \min_j \left(\frac{\delta x_j}{c_j} \right), \min_j \left(C_{vol} \frac{V_j^n}{\left| \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \right|} \right), C_t \delta t^{n-1} \right). \quad (3.55)$$

Remarque 10 *La combinaison de ces limitations permet d'assurer la préservation de la positivité [Vilar et al. 2016a,b].*


 FIGURE 3.6 – Problème de Riemann unidimensionnel autour du noeud r .

3.4 Cas particulier d'un problème de Riemman unidimensionnel

Nous nous intéressons maintenant au cas particulier d'un problème de Riemann unidimensionnel autour d'un noeud. Un problème de Riemann correspond à un problème de Cauchy où l'état initial est défini par deux états constants. En dimension un, on peut définir l'état initial par

$$\mathbf{W}(x) = \begin{cases} \mathbf{W}_1 & \text{si } x < 0, \\ \mathbf{W}_2 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.56)$$

Avec $\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \rho \\ \mathbf{u} \\ E \end{pmatrix}$. De manière à simplifier les calculs qui vont suivre, nous nous plaçons ici dans le cas d'une impédance acoustique constante, c'est à dire $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$. Pour cela, il suffit simplement de considérer un gaz parfait et de définir la masse volumique du deuxième état par $\tau_2 = \frac{p_2}{p_1} \tau_1$. Supposons aussi les vitesses initiales nulles, $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 = \mathbf{0}$. Finalement, plaçons nous dans le cas où le maillage utilisé est simplement un maillage triangulaire issu d'un maillage cartésien où chaque maille est coupée en deux (voir figure 3.6).

Le problème étant unidimensionnel, les solveurs définis dans les schémas EUCCLHYD et GLACE étant des généralisations du solveur acoustique unidimensionnel, nous aimerions

3.4. CAS PARTICULIER D'UN PROBLÈME DE RIEMMAN UNIDIMENSIONNEL

obtenir des valeurs nodales équivalentes à ce que nous donnerait le solveur acoustique unidimensionnel. Pour rappel, le solveur acoustique unidimensionnel nous donne dans le cas général :

$$\begin{aligned} u_r &= \frac{\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2}{\alpha_1 + \alpha_2} + \frac{p_1 - p_2}{\alpha_1 + \alpha_2}, \\ \left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2}\right) p_r &= \frac{p_1}{\alpha_1} + \frac{p_2}{\alpha_2} + (u_1 - u_2). \end{aligned} \quad (3.57)$$

Dans le cas d'un état initial où la vitesse est nulle et l'impédance constante, les égalités ci-dessus deviennent

$$\begin{aligned} u_r &= \frac{p_1 - p_2}{2\alpha}, \\ p_r &= \frac{p_1 + p_2}{2}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

GLACE et EUCCLHYD définissant plusieurs pressions nodales, il est impossible de les comparer à la solution attendue. Cependant, nous pouvons comparer les vitesses. Conserver la symétrie unidimensionnelle du problème reste un point très important. Nous aimerions donc obtenir une vitesse nodale orthogonale à l'interface. Dans notre cas, cela impose que la seconde composante de la vitesse soit nulle. Cependant, les calculs montrent que les vitesses nodales obtenues avec GLACE \mathbf{u}_r^G et EUCCLHYD \mathbf{u}_r^E sont de la forme

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_r^G &= \frac{p_1 - p_2}{2\alpha} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 2 - \sqrt{2} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{u}_r^E &= \frac{p_1 - p_2}{4\alpha} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 2 - \sqrt{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Il est alors évident que les directions des vitesses obtenues sont incorrectes.

Remarque 11 *En observant ce résultat il est clair qu'une erreur va être commise sur la simulation d'un tel cas. Cependant les résultats numériques montrent que les vitesses ont tendance à reprendre la bonne direction avec le temps, ce qui permet la simulation de tels cas test.*

Malgré tout, ce problème existant sur ce simple cas, il pourrait entraîner des erreurs de symétries sur des cas plus compliqués (cas test à symétrie cylindrique par exemple). L'idée du prochain chapitre est donc de chercher à régler ce problème, en espérant aussi diminuer de manière générale les erreurs liées à la symétrie des problèmes.

3.4. CAS PARTICULIER D'UN PROBLÈME DE RIEMMAN UNIDIMENSIONEL

Chapitre 4

Notre schéma

Dans ce chapitre nous présentons un nouveau schéma de type Godunov utilisant des flux nodaux. Le but est de proposer un schéma résolvant le problème présenté dans la section 3.4 du chapitre précédent. Les principes globaux seront les mêmes que ceux utilisés pour les schémas GLACE et EUCCLHYD présentés précédemment. On va donc construire un solveur nodal qui lui aussi sera une généralisation multidimensionnelle du solveur acoustique. Cependant, notre approche sera continue autour des noeuds et nous chercherons à définir une unique pression nodale contrairement aux deux schémas précédents. L'approche continue va nous permettre d'obtenir un solveur nodal qui dépendra uniquement de la répartition angulaire des variables autour du noeud et non de longueurs caractéristiques des mailles.

On montrera aussi que cette description amène à un schéma conservatif, vérifiant la même propriété de consistance faible vérifiée par GLACE.

4.1 Définitions et généralités

4.1.1 Discrétisation des équations

La première étape est de se donner une discrétisation des équations écrites sous forme semi-Lagrangienne (3.1). Nous utilisons ici la même approche que celle proposée par B.Després pour le développement du schéma GLACE, en imposant, en plus, une unique pression par

4.1. DÉFINITIONS ET GÉNÉRALITÉS

noeud. On peut alors écrire une formulation semi-discrète des équations semi-Lagrangiennes

$$\begin{aligned} M_j \frac{d}{dt} \tau_j &= \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \mathbf{u}_r, \\ M_j \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j &= - \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r}, \\ M_j \frac{d}{dt} E_j &= - \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Ici, les $\mathbf{C}_{j,r}$ sont les normales nodales définies par la relation (3.5) du chapitre précédent. Remarquons, à ce niveau, que l'unique différence avec la discrétisation faite pour GLACE (3.14) tient au fait de définir une unique pression par noeud plutôt que plusieurs.

Il reste maintenant à décrire le solveur nodal permettant de calculer ces pressions et vitesses nodales.

4.1.2 Définitions

Les idées principales des deux schémas GLACE et EUCCLHYD vont être réutilisées pour définir notre solveur nodal. Cependant, notre approche est continue autour du noeud. Avant de présenter le solveur nodal, il est nécessaire d'introduire quelques définitions et notations.

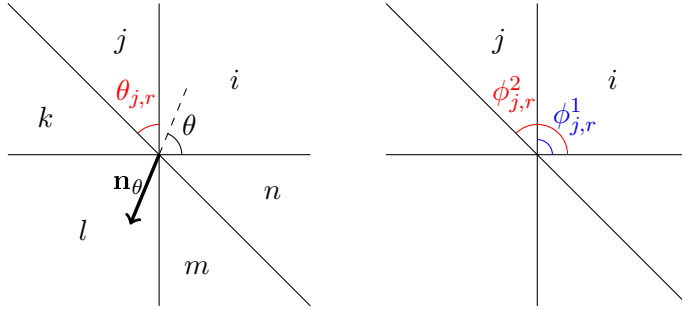


FIGURE 4.1 – Répartition angulaire autour du noeud r .

Pour toute cellule ayant r comme noeud, on définit $\phi_{j,r}^1$ et $\phi_{j,r}^2$ les angles formés par les deux arêtes de la cellule j partant de r avec un axe horizontal passant par le noeud r (voir figure 4.1). On note aussi $\theta_{j,r} = \phi_{j,r}^2 - \phi_{j,r}^1$ l'ouverture angulaire de la cellule j au noeud r .

Définition 2 Soit ω une variable physique du fluide (vitesse, pression ou impédance acoustique). On définit la variation angulaire de ω autour du noeud comme étant la fonction

$$\omega : \theta \in [0, 2\pi] \rightarrow \omega(\theta) \quad (4.2)$$

Remarque 12 *On utilise la même notation pour la variation angulaire que pour la variable physique sans faire référence au noeud r car ces fonctions ne seront utilisées, et ne font sens, qu'autour d'un noeud.*

Remarquons aussi, qu'en réalité, comme les variables physiques sont supposées constantes par mailles, la variation angulaire d'une variable ainsi définie, est une fonction constante par morceaux.

Pour exemple, on peut expliciter la forme de cette fonction dans le cadre de la figure 4.1

$$\omega(\theta) = \begin{cases} \omega_i & \text{si } \phi_{i,r}^1 < \theta < \phi_{i,r}^2, \\ \omega_j & \text{si } \phi_{j,r}^1 < \theta < \phi_{j,r}^2, \\ \omega_k & \text{si } \phi_{k,r}^1 < \theta < \phi_{k,r}^2, \\ \omega_l & \text{si } \phi_{l,r}^1 < \theta < \phi_{l,r}^2, \\ \omega_m & \text{si } \phi_{m,r}^1 < \theta < \phi_{m,r}^2, \\ \omega_n & \text{si } \phi_{n,r}^1 < \theta < \phi_{n,r}^2. \end{cases}$$

Finalement, on note $\mathbf{n}_\theta = - \begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix}$ un vecteur nodal dépendant de θ .

4.2 Solveur nodal

Décrivons maintenant le solveur nodal associé à ce schéma. Comme expliqué précédemment, les idées pour le construire sont similaires à celles du solveur GLACE. Nous allons utiliser la généralisation multidimensionnelle du solveur acoustique, associée à une relation imposant que la somme des forces autour du noeud soit nulle. Mais, au lieu de privilégier une direction particulière, nous choisissons une approche continue qui prendra en compte toutes les directions, tout en donnant un poids plus élevé aux mailles qui occupent un secteur angulaire plus grand autour du noeud.

Pour cela, il est nécessaire, dans un premier temps, de définir une pression intermédiaire $\tilde{p}_r : \theta \rightarrow \tilde{p}_r(\theta)$. Cette fonction “pression nodale” ne sera qu’un intermédiaire de calcul avant de définir une unique pression au noeud. On veut alors, comme pour GLACE et EUCCLYD, résoudre des demi-problèmes de Riemann. Au lieu de les résoudre dans des directions privilégiées (direction des normales nodales pour GLACE, et des normales aux

arêtes pour EUCCLHYD), nous allons écrire ces demi-problèmes de Riemann dans toutes les directions. De plus, on ajoute une relation imposant que la somme des forces autour du noeud soit nulle. On a donc

$$\begin{aligned} p(\theta) + \alpha(\theta) \mathbf{u}(\theta) \cdot \mathbf{n}_\theta &= \tilde{p}_r(\theta) + \alpha(\theta) \mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n}_\theta, \\ \int_0^{2\pi} \tilde{p}_r(\theta) \mathbf{n}_\theta d\theta &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Ces relations permettent de définir une unique vitesse nodale. Cependant, dans cet état, la pression nodale est une fonction de θ . Pour ne définir qu'une unique pression nodale, on fait le choix de faire une moyenne pondérée de \tilde{p}_r . Le solveur nodal devient alors, dans sa forme finale

$$\begin{aligned} p(\theta) + \alpha(\theta) \mathbf{u}(\theta) \cdot \mathbf{n}_\theta &= \tilde{p}_r(\theta) + \alpha(\theta) \mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n}_\theta, \\ \int_0^{2\pi} \tilde{p}_r(\theta) \mathbf{n}_\theta d\theta &= \mathbf{0}, \\ \left(\int_0^{2\pi} \frac{1}{\alpha(\theta)} d\theta \right) p_r &= \int_0^{2\pi} \frac{\tilde{p}_r(\theta)}{\alpha(\theta)} d\theta. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Le choix de pondérer par l'inverse de l'impédance n'est pas arbitraire. Nous expliquerons ultérieurement ce choix et son importance.

Comme pour les deux schémas présentés précédemment, le calcul des vitesses et pressions nodales à partir de ces relations est simple. On peut écrire (4.4) sous la forme

$$\begin{aligned} A_r \mathbf{u}_r &= \mathbf{B}_r, \\ \Gamma_r p_r &= \sum_{j \sim r} [\Gamma_{j,r} p_j + \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}_{j,r}], \end{aligned} \quad (4.5)$$

avec

$$\begin{aligned} A_r &= \sum_{j \sim r} A_{j,r}, \\ \mathbf{B}_r &= \sum_{j \sim r} [A_{j,r} \mathbf{u}_j + p_j \mathbf{n}_{j,r}], \\ A_{j,r} &= \alpha_j \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \mathbf{n}_\theta \otimes \mathbf{n}_\theta d\theta, \\ \mathbf{n}_{j,r} &= \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \mathbf{n}_\theta d\theta, \\ \Gamma_r &= \sum_{j \sim r} \Gamma_{j,r}, \\ \Gamma_{j,r} &= \frac{\theta_{j,r}}{\alpha_j}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Nous précisons que le calcul des matrices $A_{j,r}$ et des vecteurs $\mathbf{n}_{j,r}$ en fonction des angles $\phi_{j,r}^{1,2}$ et des ouvertures angulaires $\theta_{j,r}$ ne pose lui non plus pas de problèmes : les résultats sont explicités en annexe B.1.

Remarque 13 *Il est clair que le solveur nodal présenté ici dépend uniquement de la répartition angulaire des variables physiques (vitesse, pression, impédance acoustique) autour*

du noeud et non de longueurs caractéristiques des mailles voisines. Par exemple, sur les deux maillages présentés à la figure 4.2, notre solveur nodal donnera un résultat identique car les répartitions angulaires des données y sont identiques.

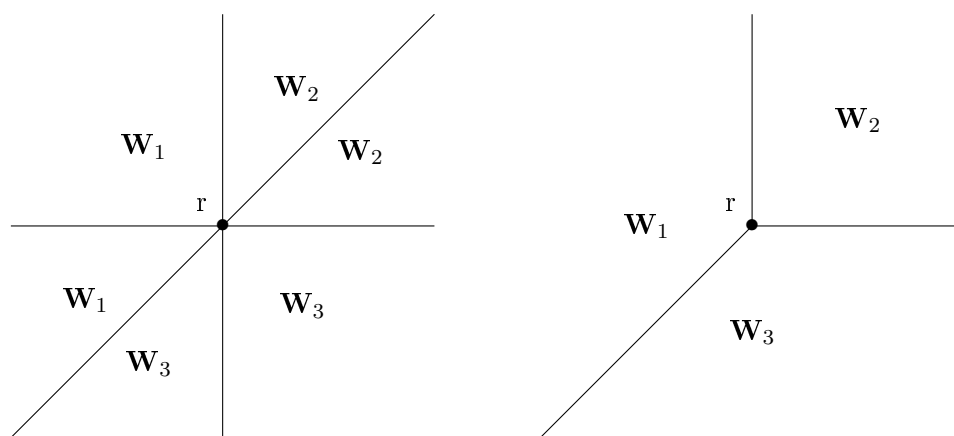


FIGURE 4.2 – Répartition angulaire au noeud r .

Remarque 14 Il est clair qu'on a pour tout noeud r intérieur au domaine (c'est-à-dire qui n'est pas sur le bord),

$$\sum_{j \sim r} n_{j,r} = 0. \quad (4.7)$$

Cette relation qui permet d'éliminer le terme correspondant à la vitesse nodale u_r dans le calcul de la pression nodale p_r .

Proposition 10 La matrice A_r définie par les relations (4.6) est symétrique définie positive.

Démonstration. Par définition $A_r = \sum_{j \sim r} A_{j,r}$. Or d'après la proposition 21 de l'annexe, les matrices $A_{j,r}$ sont symétriques définies positives. Donc A_r l'est aussi. \square

Cette proposition nous assure que le système linéaire permettant de calculer les vitesses nodales admet une unique solution car A_r est inversible.

4.3 Lien avec le solveur acoustique

Nous cherchons maintenant à comparer notre solveur nodal au solveur acoustique unidimensionnel. Nous rappelons que le solveur acoustique unidimensionnel peut se résumer

4.3. LIEN AVEC LE SOLVEUR ACOUSTIQUE

aux relations (voir Godunov et al. [1976])

$$\begin{aligned} u_r &= \frac{\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2}{\alpha_1 + \alpha_2} + \frac{p_1 - p_2}{\alpha_1 + \alpha_2}, \\ \left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2}\right) p_r &= \frac{p_1}{\alpha_1} + \frac{p_2}{\alpha_2} + (u_1 - u_2). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Théorème 2 Soit $\mathbf{W} = (\rho, \mathbf{u}, E)$. Considérons un problème de Riemann unidimensionnelle autour d'un noeud, c'est-à-dire, qu'il existe $\Theta \in [0, 2\pi]$ tel que

$$\mathbf{W}(\theta) = \begin{cases} \mathbf{W}_1 & \text{si } \theta \in [\Theta, \Theta + \pi], \\ \mathbf{W}_2 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.9)$$

On note $\mathbf{N}_\Theta = \begin{pmatrix} \sin(\Theta) \\ -\cos(\Theta) \end{pmatrix}$ un vecteur normal à l'interface. Alors, les pression et vitesse nodales données par le solveur défini en (4.4) sont

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_r &= \frac{\alpha_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \mathbf{u}_2}{\alpha_1 + \alpha_2} + \frac{4}{\pi} \frac{p_1 - p_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \mathbf{N}_\Theta, \\ \left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2}\right) p_r &= \left(\frac{p_1}{\alpha_1} + \frac{p_2}{\alpha_2}\right) + \frac{2}{\pi} (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) \cdot \mathbf{N}_\Theta. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Démonstration. En utilisant la remarque 13, il est clair que ce problème est indépendant du maillage utilisé autour du noeud. Le solveur nodal (4.4) se ramène alors à

$$\begin{aligned} \left(\int_0^{2\pi} \alpha(\theta) \mathbf{n}_\theta \otimes \mathbf{n}_\theta d\theta\right) \mathbf{u}_r &= \alpha_1 \left(\int_\Theta^{\Theta+\pi} \mathbf{n}_\theta \otimes \mathbf{n}_\theta d\theta\right) \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \left(\int_{\Theta+\pi}^{\Theta+2\pi} \mathbf{n}_\theta \otimes \mathbf{n}_\theta d\theta\right) \mathbf{u}_2 + \\ &\quad + p_1 \left(\int_\Theta^{\Theta+\pi} \mathbf{n}_\theta d\theta\right) + p_2 \left(\int_{\Theta+\pi}^{\Theta+2\pi} \mathbf{n}_\theta d\theta\right), \\ \pi \left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2}\right) p_r &= \frac{\pi}{\alpha_1} p_1 + \frac{\pi}{\alpha_2} p_2 + \left(\int_\Theta^{\Theta+\pi} \mathbf{n}_\theta d\theta\right) \cdot \mathbf{u}_1 + \left(\int_{\Theta+\pi}^{\Theta+2\pi} \mathbf{n}_\theta d\theta\right) \cdot \mathbf{u}_2. \end{aligned}$$

Les calculs faits à l'annexe B.1 permettent ensuite de conclure. \square

Remarque 15 Ce théorème nous montre que, si l'on considère un problème de Riemann unidimensionnel, la vitesse nodale donnée par notre solveur aura toujours la bonne direction. On a donc bien développé un solveur nodal qui résout le problème mis à jour en 3.4.

D'autre part, on remarque que sur des problèmes unidimensionnels, notre solveur donne presque les mêmes valeurs que celles données par le solveur acoustique classique. La forme des pression et vitesse nodales sont similaires, et on voit apparaître l'importance de la pondération par l'inverse de l'impédance pour calculer la pression nodale.

De plus, il est possible d'obtenir exactement le solveur acoustique pour les problèmes unidimensionnels en modifiant légèrement (4.5) par

$$\begin{aligned} A_r \mathbf{u}_r & \sum_{j \sim r} [A_{j,r} \mathbf{u}_j + \frac{\pi}{4} p_j \mathbf{n}_{j,r}], \\ \Gamma_r p_r & = \sum_{j \sim r} [\Gamma_{j,r} p_j + \frac{\pi}{2} \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}_{j,r}]. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Cependant, les résultats numériques n'ont pas montré de différences importantes lorsque l'on applique cette modification. En conséquence, sauf si le contraire est précisé, nous n'utiliserons pas cette modification dans la suite.

Finalement, il semble évident que les coefficients seraient modifiés d'une manière différente dans le cadre d'une adaptation de ce schéma à des espaces de dimension trois. Dans le cadre d'une potentielle extension de ce schéma, les différences avec le solveur acoustique ont été déterminées dans le cadre d'un espace de dimension trois à l'annexe B.4.

4.4 Discrétisation temporelle

4.4.1 Discrétisation temporelle

Dans un premier temps, les opérateurs temporels sont discrétisés grâce à une approche de type Euler à un pas comme pour les schémas précédents.

$$\begin{aligned} M_j \frac{\tau_j^{n+1} - \tau_j^n}{\delta t^n} & = \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \mathbf{u}_r, \\ M_j \frac{\mathbf{u}_j^{n+1} - \mathbf{u}_j^n}{\delta t^n} & = - \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} p_r, \\ M_j \frac{E_j^{n+1} - E_j^n}{\delta t^n} & = - \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Dans le cadre d'un schéma du premier ordre en temps et en espace cette approche est suffisante. Nous précisons cependant que, dans la partie 4.9, nous proposerons de discrétiser la dérivée en temps grâce à une méthode de type Runge-Kutta dans le cadre de l'extension du schéma à l'ordre 2.

Nous rappelons par ailleurs que le pas de temps nécessaire à la mise à jour du schéma est, ici aussi, déterminé de la même manière que pour le schéma GLACE. Cela a été présenté à la partie 3.3.

4.4.2 Résumé

L'utilisation de ce schéma peut alors se résumer de la manière suivante

1. Déterminer le pas de temps δt (voir la section 3.3).
2. Calculer les angles $\phi_{j,r}^1$ et $\phi_{j,r}^2$ de chaque cellule voisine du noeud r , et en déduire les matrices $A_{j,r}$, A_r , les vecteurs $\mathbf{n}_{j,r}$ et les réels $\Gamma_{j,r}$ et Γ_r en utilisant l'annexe 4.5.
3. Calculer les vitesses nodales \mathbf{u}_r et pressions nodales p_r avec les relations (4.4).
4. Calculer les normales nodales $\mathbf{C}_{j,r}$ et mettre à jour la vitesse et l'énergie totale au centre des mailles

$$\begin{aligned} M_j \frac{\mathbf{u}_j^{n+1} - \mathbf{u}_j^n}{\delta t} &= - \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} p_r, \\ M_j \frac{E_j^{n+1} - E_j^n}{\delta t} &= - \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r. \end{aligned} \quad (4.13)$$

5. Mettre à jour la position des noeuds

$$\mathbf{x}_r^{n+1} = \mathbf{x}_r^n + \delta t \mathbf{u}_r. \quad (4.14)$$

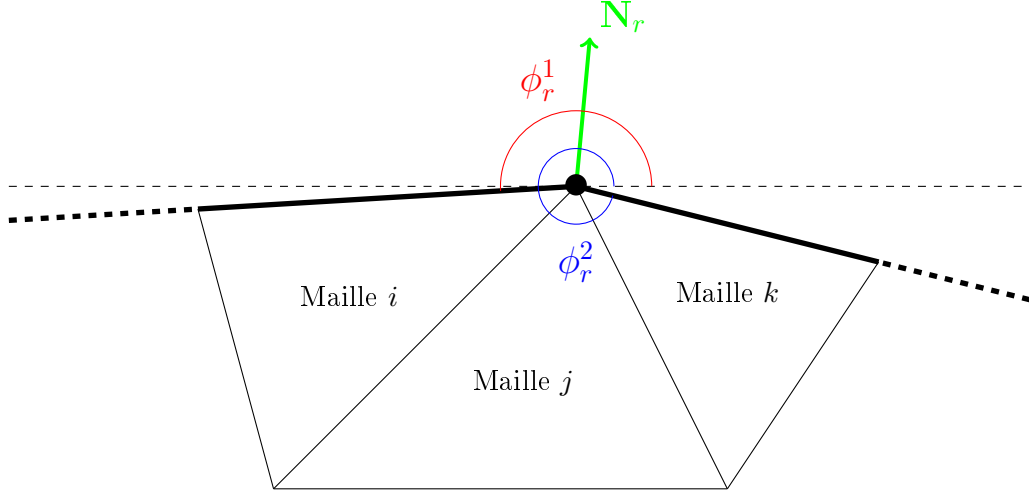
6. Déterminer les volumes V_j^{n+1} et mettre à jour les volumes massiques avec la conservation de la masse grâce à la remarque faite à la section 3.1.4

$$\tau_j^{n+1} = \frac{V_j^{n+1}}{V_j^n} \tau_j^n. \quad (4.15)$$

4.5 Conditions aux bords

Notre schéma numérique étant proche des schémas GLACE et EUCCLHYD, les conditions aux bords sont essentiellement traitées de la même manière. Toutefois, l'approche continue du solveur nodal change légèrement ces conditions. Pour être complet, nous précisons donc ici comment adapter ce qui a été expliqué dans la partie 3.1.2.3.

Dans la suite de cette partie, on notera ϕ_r^1 et ϕ_r^2 les angles correspondant aux arêtes situées sur le bord du domaine, comme montré à la figure 4.3. De plus, nous notons $\mathbf{N}_r = \int_{\phi_r^1}^{\phi_r^2} \mathbf{n}_\theta d\theta$.


 FIGURE 4.3 – Définitions pour les conditions aux bords à un noeud r .

4.5.1 Vitesse imposée

Considérons un noeud r au bord du domaine. Supposons que l'on veuille imposer une vitesse \mathbf{u}_{imp} à ce noeud. On fixe alors

$$\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_{imp}. \quad (4.16)$$

Le calcul de la pression nodale se fait de la même manière qu'en (4.4) mais en ne faisant la moyenne de \tilde{p}_r que sur la partie à l'intérieur du domaine

$$\left(\int_{\phi_r^1}^{\phi_r^2} \frac{1}{\alpha(\theta)} d\theta \right) p_r = \int_{\phi_r^1}^{\phi_r^2} \frac{\tilde{p}_r(\theta)}{\alpha(\theta)} d\theta. \quad (4.17)$$

De fait, cela se réduit à la même expression que celle en (4.5), en ajoutant une composante dépendant de la vitesse nodale

$$\begin{aligned} \Gamma_r p_r &= \sum_{j \sim r} [\Gamma_{j,r} p_j + \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}_{j,r}] - \mathbf{u}_r \cdot \mathbf{N}_r, \\ \mathbf{n}_{j,r} &= \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \mathbf{n}_\theta d\theta, \\ \Gamma_r &= \sum_{j \sim r} \Gamma_{j,r}, \\ \Gamma_{j,r} &= \frac{\theta_{j,r}}{\alpha_j}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

4.5.2 Mur glissant

Considérons un noeud r situé sur un bord du domaine correspondant à un mur sur lequel on autorise les glissements le long de la paroi. Notons \mathbf{n} un vecteur unitaire normal

à la paroi au niveau du noeud r et \mathbf{t} un vecteur unitaire tangent. On veut alors imposer

$$\mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (4.19)$$

De la même manière que pour le schéma GLACE, cette condition n'est pas directement compatible avec le solveur nodal (4.4). On réduit donc la condition sur la somme des forces à sa projection le long de la direction tangentielle, ce qui donne

$$\begin{aligned} p(\theta) + \alpha(\theta) \mathbf{u}(\theta) \cdot \mathbf{n}_\theta &= \tilde{p}_r(\theta) + \alpha(\theta) \mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n}_\theta, \\ \left(\int_0^{2\pi} \tilde{p}_r(\theta) \mathbf{n}_\theta d\theta \right) \cdot \mathbf{t} &= 0, \\ \mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n} &= 0. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Ce système d'équation forme un système linéaire qu'il est possible de résoudre exactement.

Proposition 11 *Supposons que les matrices A_r et B_r aient été calculées grâce aux relations (4.5). On définit*

$$\begin{aligned} \tilde{A}_r &= (I - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) A_r (I - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \text{tr}(A_r) \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \\ \tilde{B}_r &= (I - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) B_r, \end{aligned} \quad (4.21)$$

où I représente ici la matrice identité. Soit \mathbf{u}_r une solution du système linéaire défini par les matrices \tilde{A}_r et \tilde{B}_r . Alors \mathbf{u}_r est solution du système linéaire défini par (4.20).

La preuve étant identique à celle faite pour la proposition 4 du deuxième chapitre, nous ne la refaisons pas.

Il reste maintenant à déterminer la pression nodale p_r . Ce calcul se fait de la même manière qu'en (4.17). Remarquons de plus que \mathbf{N}_r et \mathbf{n} sont colinéaires. Donc la composante liée à la vitesse nodale, dans le calcul de la pression nodale, sera nulle. Le calcul de la pression p_r se réduit donc à (4.5), c'est-à-dire

$$\begin{aligned} \Gamma_r p_r &= \sum_{j \sim r} [\Gamma_{j,r} p_j + \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}_{j,r}], \\ \mathbf{n}_{j,r} &= \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \mathbf{n}_\theta d\theta, \\ \Gamma_r &= \sum_{j \sim r} \Gamma_{j,r}, \\ \Gamma_{j,r} &= \frac{\theta_{j,r}}{\alpha_j}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

4.5.3 Pression extérieure imposée

Considérons maintenant un noeud r du bord du domaine tel que la pression p_{ext} à l'extérieur de ce domaine soit imposée. Le calcul de la vitesse nodale se fait alors de la même manière que ce qui a été fait pour les conditions aux bords pour le schéma GLACE

$$\begin{aligned} p(\theta) + \alpha(\theta) \mathbf{u}(\theta) \cdot \mathbf{n}_\theta &= \tilde{p}_r(\theta) + \alpha(\theta) \mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n}_\theta, \\ \int_{\phi_r^1}^{\phi_r^2} \tilde{p}_r(\theta) \mathbf{n}_\theta d\theta + \int_{\phi_r^2}^{\phi_r^1+2\pi} p_{ext} \mathbf{n}_\theta d\theta &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Cela est équivalent à la modification du terme \mathbf{B}_r de (4.6), de la façon suivante

$$\mathbf{B}_r = \sum_{j \sim r} [A_{j,r} \mathbf{u}_j + p_j \mathbf{n}_{j,r}] - p_{ext} \mathbf{N}_r. \quad (4.24)$$

Le calcul de la pression nodale se fait alors de la même manière que lorsque que la vitesse nodale est imposée (4.18).

4.5.4 Conditions mixtes aux coins

Au niveau d'un noeud situé sur un coin du domaine, il est possible d'avoir une condition de mur glissant couplé à une condition de pression extérieure imposée. Pour prendre en compte ces deux conditions, on modifie d'abord \mathbf{B}_r avec (4.24) pour prendre en compte la condition de pression extérieure imposée. Puis, on applique la proposition 11 pour prendre en compte le mur. La pression nodale est ensuite calculée avec (4.18).

4.6 Propriétés du schéma

4.6.1 Conservativité

Proposition 12 *Le schéma numérique est conservatif en masse, quantité de mouvement et énergie totale.*

Démonstration. La preuve est évidente et découle du fait que nous définissons une unique pression et une unique vitesse par noeud. \square

4.6.2 Consistance faible

Nous montrons, dans cette partie, que notre schéma vérifie une propriété de consistance faible. La preuve est essentiellement extraite de celle faite par Després [2010] pour le

schéma GLACE. Nous ne démontrerons que les propositions exposées dans [Després 2010] utilisant le solveur nodal. Le reste de la preuve, étant essentiellement le retour en coordonnées Eulériennes, est identique et ne sera pas démontré ici. Les théorèmes à démontrer correspondent aux théorèmes 12 et 13 de [Després 2010, p.2674].

Nous précisons aussi que, dans le cadre de cette preuve, nous nous plaçons dans le cas général d'un espace de dimension d pour de futures applications. De plus, nous souhaitons ici mettre en évidence l'influence de l'impédance acoustique sur l'erreur de consistance.

Dans un premier temps, rappelons que les $\mathbf{C}_{j,r}$ vérifient la propriété suivante.

Proposition 13 *Pour toute cellule j , on a l'égalité*

$$\sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \otimes \mathbf{x}_r = V_j \mathbf{I}, \quad (4.25)$$

où V_j est le volume de la maille j et \mathbf{I} correspond à la matrice identité.

On utilisera aussi la propriété suivante démontrée par [Després 2010, proposition 9 p.2673]

Proposition 14 *Soit Ω_j une maille. On a l'inégalité*

$$|\mathbf{C}_{j,r}| \leq \beta_0 \text{diam}(\Omega_j)^{d-1}, \quad (4.26)$$

où diam est la fonction donnant le diamètre d'une maille.

Théorème 3 *Soit $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \sum_j \left(\sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \right) \frac{1_{\Omega_j}(\mathbf{x})}{V_j}$. Supposons que l'impédance acoustique est uniformément bornée $0 \leq \beta_1 \leq \alpha_j \leq \beta_2$. Supposons le maillage régulier, dans le sens où, $\beta_3 h^d \leq V_j$ et $\text{diam}(\Omega_j) \leq \beta_4 h$ pour toute maille, avec $\beta_3, \beta_4 \geq 0$, des constantes uniformes. Supposons de plus que $(p_j)_j$ et $(\mathbf{u}_j)_j$ sont bornées dans L^∞ et dans le sens BV*

$$\sum_j \sum_{k \in V(j)} h^{d-1} |p_j - p_k| \leq \beta_5, \quad (4.27)$$

$$\sum_j \sum_{k \in V(j)} h^{d-1} |\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_k| \leq \beta_6, \quad (4.28)$$

où $V(j)$ est l'ensemble des cellules voisines de j . Alors

$$\mathbf{B} - \nabla p = (1 + \beta_2) O(h), \quad (4.29)$$

au sens faible dans $H^{-1}(\Omega)$.

Lemme 1 Soit r un noeud. Supposons $(\mathbf{u}_j)_j$ et $(p_j)_j$ dans L^∞ . Supposons qu'on ait

$$\exists \beta_1 > 0, \exists \beta_2 > 0, \forall j, 0 < \beta_1 \leq \alpha_j \leq \beta_2. \quad (4.30)$$

Alors $(p_r)_r$ est aussi dans L^∞ et

$$\|p_r\|_{L^\infty} \leq \|p_j\|_{L^\infty} + \beta_2 \|\mathbf{u}_k\|_{L^\infty}, \quad (4.31)$$

Démonstration du Lemme 1. Rappelons que, d'après (4.5), on a

$$\begin{aligned} |p_r| &= \left| \sum_{k \sim r} \left[\frac{\Gamma_{k,r}}{\Gamma_r} p_k + \frac{\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_{k,r}}{\Gamma_r} \right] \right|, \\ &\leq \|p_k\|_{L^\infty} + \|\mathbf{u}_k\|_{L^\infty} \sum_{k \sim r} \frac{|\mathbf{n}_{k,r}|}{\Gamma_r}. \end{aligned}$$

Or $\Gamma_r = \sum_{k \sim r} \frac{\theta_{k,r}}{\alpha_k} \geq \frac{2\pi}{\beta_2}$ et $|\mathbf{n}_{k,r}| \leq 2\pi$. Donc

$$\|p_r\|_{L^\infty} \leq \|p_k\|_{L^\infty} + \beta_2 \|\mathbf{u}_k\|_{L^\infty}.$$

□

Démonstration du théorème 3. Nous utiliserons le lemme 1 pour borner les pressions nodales dans la suite. Considérons maintenant $\phi : \mathbf{x} \rightarrow \phi(\mathbf{x})$ une fonction test à support compact.

$$\begin{aligned} \int \mathbf{B}(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \sum_j \left(\sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \right) \frac{1}{V_j} \int_{\Omega_j} \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \\ &= \sum_j \left(\sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \right) \phi(\mathbf{x}_j) + \sum_j \left(\sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \right) \left(\frac{1}{V_j} \int_{\Omega_j} \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \phi(\mathbf{x}_j) \right), \end{aligned}$$

où $\mathbf{x}_j = \frac{1}{V_j} \int_{\Omega_j} \mathbf{x} d\mathbf{x}$ est le centre de gravité de la maille j . Remarquons de plus, qu'il est connu que

$$\frac{1}{V_j} \int_{\Omega_j} \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \phi(\mathbf{x}_j) = O(h^2). \quad (4.32)$$

De plus, en utilisant la proposition 14 et l'hypothèse portant sur le diamètre des mailles, on a,

$$|\mathbf{C}_{j,r}| \leq \beta_0 \beta_4 h^{d-1}. \quad (4.33)$$

4.6. PROPRIÉTÉS DU SCHEMA

Finalement, en utilisant l'hypothèse portant sur la régularité du maillage, on sait que le support de ϕ contient au plus $\frac{\text{mes}(\text{supp}(\phi))}{\min_j(V_j)} \leq \frac{\text{mes}(\text{supp}(\phi))}{\beta_3 h^d} = O(h^{-d})$. En combinant cette dernière relation avec (4.32), (4.33) et le lemme 1, on obtient

$$\sum_j \left(\sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \right) \left(\frac{1}{V_j} \int_{\Omega_j} \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \phi(\mathbf{x}_j) \right) = (\|p_k\|_{L^\infty} + \beta_2 \|\mathbf{u}_k\|_{L^\infty}) O(h). \quad (4.34)$$

Remarquons que nous ne sommes intéressés que par la dépendance de l'erreur de consistance à l'impédance. Nous écrivons donc que $(\|p_k\|_{L^\infty} + \beta_2 \|\mathbf{u}_k\|_{L^\infty}) O(h) = (1 + \beta_2) O(h)$.

Rappelons que $\sum_{j \sim r} \mathbf{C}_{j,r} = \mathbf{0}$. On peut donc écrire

$$\sum_j \left(\sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \right) \phi(\mathbf{x}_j) = \sum_j \sum_{r \sim j} [p_r \mathbf{C}_{j,r} (\phi(\mathbf{x}_j) - \phi(\mathbf{x}_r))].$$

En utilisant un développement de Taylor on remarque que $\phi(\mathbf{x}_j) - \phi(\mathbf{x}_r) = \nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_r) + O(h^2)$. De plus, en utilisant un calcul similaire à ce qui a été fait pour obtenir (4.34), on obtient

$$\begin{aligned} \int \mathbf{B}(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \sum_j \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_r) + (1 + \beta_2) O(h), \\ &= \underbrace{\sum_j \sum_{r \sim j} p_j \mathbf{C}_{j,r} \nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_r)}_{C_1} + \underbrace{\sum_j \sum_{r \sim j} (p_r - p_j) \mathbf{C}_{j,r} (\nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_r))}_{C_2} \\ &\quad + (1 + \beta_2) O(h). \end{aligned}$$

Nous allons maintenant traiter le terme C_2 . Remarquons que les résultats précédents nous donnent

$$|\mathbf{C}_{j,r}| |\nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_r)| = O(h^d). \quad (4.35)$$

D'autre part, en utilisant le solveur nodal présenté en (4.5), le fait que $\sum_{k \sim r} \frac{\Gamma_{k,r}}{\Gamma_r} = 1$ et que

$\sum_{k \sim r} \mathbf{n}_{k,r} = \mathbf{0}$ on a

$$\begin{aligned} |p_r - p_j| &= \left| \sum_{k \sim r} \frac{\Gamma_{k,r}}{\Gamma_r} (p_k - p_j) + \frac{1}{\Gamma_r} \sum_{k \sim r} (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{n}_{k,r} \right|, \\ &\leq \sum_{k \sim r} |p_k - p_j| + \frac{1}{\Gamma_r} \sum_{k \sim r} |(\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{n}_{k,r}|. \end{aligned}$$

Par ailleurs, on a $\frac{1}{\Gamma_r} \leq \frac{\beta_2}{2\pi}$ et $|\mathbf{n}_{k,r}| \leq 2\pi$, ce qui nous donne

$$|p_r - p_j| \leq \sum_{k \sim r} |p_k - p_j| + \beta_2 \sum_{k \sim r} |\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_j|.$$

En conséquence, en utilisant le fait que $(p_j)_j$ est à variation bornée (4.27) on a

$$\left| \sum_j \sum_{r \sim j} (p_r - p_j) \right| = (1 + \beta_2) O(h^{1-d}). \quad (4.36)$$

En couplant ce résultat à (4.35), on obtient

$$C_2 = (1 + \beta_2) O(h). \quad (4.37)$$

Il nous reste maintenant à traiter le terme C_1 . Rappelant que $\sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} = \mathbf{0}$, on peut écrire

$$\begin{aligned} C_1 &= - \sum_j p_j \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} (\nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot \mathbf{x}_r), \\ &= - \sum_j p_j \left(\sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \otimes \mathbf{x}_r \right) \nabla \phi(\mathbf{x}_j). \end{aligned}$$

En appliquant la proposition 13, puis en remarquant que $\frac{1}{V_j} \int_{\Omega_j} \nabla \phi(\mathbf{x}) - \nabla \phi(\mathbf{x}_j) = O(h^2)$ on obtient

$$C_1 = - \int p(\mathbf{x}) \nabla \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \|p_j\|_{L^\infty} O(h).$$

Les résultats ci-dessus nous donnent donc

$$\mathbf{B} - \nabla p = (1 + \beta_2) O(h),$$

ce qui conclut la preuve du théorème. \square

Remarque 16 *Pour prouver la consistance faible, le facteur $(1 + \beta_2)$ n'est pas nécessaire. Cependant, nous avons souhaité mettre en évidence le rôle que peut avoir l'impédance sur l'erreur de consistance. Ce théorème nous montre donc qu'on vérifie une propriété de consistance faible, mais que l'erreur de consistance est multipliée par une constante dépendant de l'impédance. Dans le cas d'impédances élevées, cela peut entraîner des erreurs importantes dans les résultats numériques. Nous mettons en évidence ce problème à l'annexe B.2.*

Nous allons maintenant démontrer le même théorème pour l'opérateur $\nabla \cdot (p\mathbf{u})$.

Théorème 4 *Soit $C(\mathbf{x}) = \sum_j \left(\sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \right) \frac{1_{\Omega_j}(\mathbf{x})}{V_j}$. Supposons que les hypothèses du théorème 3 soient vérifiées. Alors*

$$C - \nabla \cdot (p\mathbf{u}) = (1 + \beta_2) \left(\frac{\beta_2^2}{\beta_1^2} + \frac{\beta_2}{\beta_1^2} \right) O(h), \quad (4.38)$$

au sens faible dans $H^{-1}(\Omega)$.

Lemme 2 Soit r un noeud. Supposons $(\mathbf{u}_j)_j$ et $(p_j)_j$ dans L^∞ . Supposons qu'on ait $0 < \beta_1 \leq \alpha_j \leq \beta_2$. Alors $(\mathbf{u}_r)_r$ est aussi dans L^∞ et

$$\|\mathbf{u}_r\|_{L^\infty} \leq C \left(\frac{\beta_2^2}{\beta_1^2} \|\mathbf{u}_j\|_{L^\infty} + \frac{\beta_2}{\beta_1^2} \|p_j\|_{L^\infty} \right), \quad (4.39)$$

où C est une constante positive ne dépendant pas des impédances.

Démonstration du lemme 2. On rappelle que (4.5) nous donne

$$\mathbf{u}_r = A_r^{-1} \sum_{j \sim r} [A_{j,r} \mathbf{u}_j + p_j \mathbf{n}_{j,r}].$$

Notons $\|\cdot\|_\infty$ la norme matricielle induite par la norme $\|\cdot\|_\infty$ sur \mathbb{R}^2 . Nous allons dans un premier temps chercher à borner $\|A_r\|_\infty$ en faisant ressortir les constantes β_1 et β_2 . On rappelle qu'en dimension finie, toutes les normes étant équivalentes, le choix de la norme n'a pas d'importance. Nous choisissons donc d'utiliser la norme infinie qui permet de simplifier les calculs. L'annexe B.1 nous donne

$$A_r = \sum_{j \sim r} \left[\frac{\alpha_j}{2} \theta_{j,r} I + \frac{\alpha_j}{2} \sin(\theta_{j,r}) \begin{pmatrix} \cos(\Phi_{j,r}) & \sin(\Phi_{j,r}) \\ \sin(\Phi_{j,r}) & -\cos(\Phi_{j,r}) \end{pmatrix} \right],$$

où on a $\theta_{j,r} = \phi_{j,r}^2 - \phi_{j,r}^1$ et $\Phi_{j,r} = \phi_{j,r}^1 + \phi_{j,r}^2$. De manière à simplifier les notations, nous omettrons dans la suite les indices r faisant référence au noeud sur les angles. Remarquons qu'on a alors

$$A_r^{-1} = \frac{1}{\det(A_r)} \underbrace{\sum_{j \sim r} \left[\frac{\alpha_j}{2} \theta_j I - \frac{\alpha_j}{2} \sin(\theta_j) \begin{pmatrix} \cos(\Phi_j) & \sin(\Phi_j) \\ \sin(\Phi_j) & -\cos(\Phi_j) \end{pmatrix} \right]}_{M_r}.$$

De plus, pour une matrice carré $M = (m_{i,j})$ de dimension finie n , on a

$$\|M\|_\infty = \max_i \left(\sum_{j=1}^n |m_{i,j}| \right).$$

Donc, en notant $\eta_1 = \left| \sum_{j \sim r} \frac{\alpha_j}{2} [\theta_j - \sin(\theta_j) \cos(\Phi_j)] \right| + \left| \sum_{j \sim r} \frac{\alpha_j}{2} [\sin(\theta_j) \sin(\Phi_j)] \right|$ et $\eta_2 = \left| \sum_{j \sim r} \frac{\alpha_j}{2} [\theta_j + \sin(\theta_j) \cos(\Phi_j)] \right| + \left| \sum_{j \sim r} \frac{\alpha_j}{2} [\sin(\theta_j) \sin(\Phi_j)] \right|$, on a

$$\|M_r\|_\infty = \max(\eta_1, \eta_2).$$

4.6. PROPRIÉTÉS DU SCHEMA

Il est donc clair que

$$\|M_r\|_\infty \leq \beta_2 J [\pi + 1],$$

où $J = \max_r (\# \{j \sim r\})$. Il suffit donc maintenant de minorer $\det(A_r)$.

$$\begin{aligned} \det(A_r) &= \left\{ \sum_{j \sim r} \left[\frac{\alpha_j}{2} \theta_j + \frac{\alpha_j}{2} \sin(\theta_j) \cos(\Phi_j) \right] \right\} \left\{ \sum_{j \sim r} \left[\frac{\alpha_j}{2} \theta_j - \frac{\alpha_j}{2} \sin(\theta_j) \cos(\Phi_j) \right] \right\} - \\ &\quad - \left\{ \sum_{j \sim r} \left[\frac{\alpha_j}{2} \sin(\theta_j) \sin(\Phi_j) \right] \right\}^2, \\ &= \left\{ \sum_{j \sim r} \frac{\alpha_j}{2} \theta_j \right\}^2 - \left\{ \sum_{j \sim r} \frac{\alpha_j}{2} \sin(\theta_j) \cos(\Phi_j) \right\}^2 - \left\{ \sum_{j \sim r} \frac{\alpha_j}{2} \sin(\theta_j) \sin(\Phi_j) \right\}^2, \\ &= \sum_{j \sim r} \sum_{k \sim r} \frac{\alpha_j \alpha_k}{4} \{ \theta_j \theta_k - \sin(\theta_j) \sin(\theta_k) [\cos(\Phi_j) \cos(\Phi_k) + \sin(\Phi_j) \sin(\Phi_k)] \} \end{aligned}$$

Remarquons que

$$\cos(\Phi_j) \cos(\Phi_k) + \sin(\Phi_j) \sin(\Phi_k) = \cos(\Phi_j - \Phi_k).$$

Rappelons, que les angles $\theta_j \in [0, 2\pi]$ sont les ouvertures angulaires. De plus, on a

$$\forall x \in [0, 2\pi], |\sin(x)| \leq x.$$

Donc tous les termes de la somme sont positifs. On peut donc écrire, en ne considérant que les termes diagonaux,

$$\det(A_r) \geq \frac{\beta_1^2}{4} \sum_{j \sim r} [\theta_j^2 - \sin^2(\theta_j)].$$

Remarquons que l'application $x \rightarrow x^2 - \sin^2(x)$ est croissante sur $[0, 2\pi]$. De plus, comme

$\sum_{j \sim r} \theta_j = 2\pi$, il existe nécessairement une cellule K voisine du noeud r telle que

$$\theta_K \geq \frac{2\pi}{J}.$$

On a donc

$$d \geq \frac{\beta_1^2}{4} \left[\left(\frac{2\pi}{J} \right)^2 - \sin^2 \left(\frac{2\pi}{J} \right) \right].$$

On obtient, en rassemblant les résultats précédents

$$\|A_r^{-1}\|_\infty \leq \frac{\beta_2}{\beta_1^2} \frac{4J(\pi + 1)}{\left(\frac{2\pi}{J} \right)^2 - \sin^2 \left(\frac{2\pi}{J} \right)}$$

Finalement, on peut écrire

$$\|\mathbf{u}_r\|_{L^\infty} \leq \|A_r^{-1}\|_\infty \left[2\pi \|p_j\|_{L^\infty} + \|\mathbf{u}_j\|_{L^\infty} \sum_{j \sim r} \|A_{j,r}\|_\infty \right].$$

Or, avec des méthodes similaires à celles utilisées précédemment, on peut montrer que

$$\|A_{j,r}\|_\infty \leq \beta_2 (\pi + 1).$$

Ce qui conclut la preuve. \square

Démonstration du théorème 4. La preuve du théorème se fait essentiellement de la même manière que pour le théorème précédent en remarquant que

$$p_r \mathbf{u}_r = p_j \mathbf{u}_j + p_r (\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_j) + \mathbf{u}_j (p_r - p_j). \quad (4.40)$$

Nous utiliserons dans la preuve le lemme 1 pour borner les pressions nodales et le lemme 2 pour borner les vitesses nodales.

$$\begin{aligned} \int C(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \sum_j \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \frac{1}{V_j} \int_{\Omega_j} \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \\ &= \sum_j \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \phi(\mathbf{x}_j) + (1 + \beta_2) \left(\frac{\beta_2^2}{\beta_1^2} + \frac{\beta_2}{\beta_1^2} \right) O(h), \\ &= \sum_j \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r (\phi(\mathbf{x}_j) - \phi(\mathbf{x}_r)) + (1 + \beta_2) \left(\frac{\beta_2^2}{\beta_1^2} + \frac{\beta_2}{\beta_1^2} \right) O(h), \\ &= \sum_j \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_r) + (1 + \beta_2) \left(\frac{\beta_2^2}{\beta_1^2} + \frac{\beta_2}{\beta_1^2} \right) O(h), \\ &= \underbrace{\sum_j \sum_{r \sim j} p_j \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_j \nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_r)}_{C_1} + \underbrace{\sum_j \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot (\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_j) \nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_r)}_{C_2} \\ &\quad + \underbrace{\sum_j \sum_{r \sim j} (p_r - p_j) \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_j \nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_r)}_{C_3} + (1 + \beta_2) \left(\frac{\beta_2^2}{\beta_1^2} + \frac{\beta_2}{\beta_1^2} \right) O(h). \end{aligned}$$

Le terme C_3 a déjà été traité pour la preuve du théorème précédent, et on a vu que

$$C_3 = (1 + \beta_2) O(h). \quad (4.41)$$

D'autre part, des calculs similaires à ceux faits pour obtenir (4.36) nous donnent

$$C_2 = (1 + \beta_2) \left(\frac{\beta_2^2}{\beta_1^2} + \frac{\beta_2}{\beta_1^2} \right) O(h). \quad (4.42)$$

Finalement

$$\begin{aligned}
 C_1 &= - \sum_j \sum_{r \sim j} p_j \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_j \nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot \mathbf{x}_r, \\
 &= - \sum_j V_j \nabla \phi(\mathbf{x}_j) \cdot (p_j \mathbf{u}_j) + O(h), \\
 &= - \int p(\mathbf{x}) \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + O(h).
 \end{aligned}$$

On a donc

$$\int C(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = - \int p(\mathbf{x}) \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + (1 + \beta_2) \left(\frac{\beta_2^2}{\beta_1^2} + \frac{\beta_2}{\beta_1^2} \right) O(h).$$

Ce qui conclut la preuve. \square

Les deux théorèmes démontrés ici sont des théorèmes de consistance faible. Cependant, ils sont écrits dans un cadre Lagrangien. Il est en fait possible de les réécrire dans un cadre Eulérien comme le fait Després [2010]. Nous ne le ferons pas ici, car les théorèmes et les preuves obtenus seront les mêmes, car indépendants du solveur nodal utilisé.

Remarque 17 *Les théorèmes 4 et 3 ont été écrits en dimension quelconque. Cependant, il est clair que les preuves nécessitent l'expression du solveur nodal qui, lui, est écrit en dimension deux. Cependant, nous utilisons uniquement le fait que les valeurs nodales sont définies comme étant des "formes" de moyennes des vitesses et pressions des cellules voisines. Il est clair que, de part sa construction, on conservera cette forme dans le cadre d'une extension du schéma en dimension supérieur. Nous précisons d'ailleurs, que nous proposons une première extension de ce solveur en annexe B.4.*

4.6.3 A propos de l'inégalité entropique

Nous nous intéressons maintenant à l'entropie. En effet, nous avons vu dans le chapitre précédent que les schémas GLACE et EUCCLHYD vérifient une inégalité entropique. Cependant, le schéma que nous décrivons dans ce chapitre ne vérifie à priori pas cette inégalité. En effet, on peut écrire

$$M_j T_j \frac{d}{dt} s_j = \sum_{r \sim j} (p_j - p_r) (\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{C}_{j,r}. \quad (4.43)$$

Or, contrairement aux deux schémas du chapitre précédent, il n'est ici pas possible de conclure sur le signe de $\frac{d}{dt} s_j$. Cette faiblesse du schéma pourrait entraîner, dans certains

cas, des problèmes dans le calcul de chocs forts. Nous essayerons d'ailleurs de déterminer dans le chapitre suivant si ce défaut est à l'origine de problèmes.

Tout en ne les ayant pas toutes explorées dans le cadre de cette thèse, plusieurs pistes sont possibles pour récupérer des résultats sur l'entropie. La première idée serait d'introduire une viscosité artificielle, de la même manière que ce qui se fait avec des schémas aux différences finies [VonNeumann et Richtmyer 1950; Caramana et al. 1998b; Campbell et Shashkov 2001]. Cette viscosité permet d'augmenter l'entropie en dissipant de l'énergie cinétique.

Une seconde possibilité serait de travailler en énergie interne plutôt que de travailler en énergie totale. On considérerait alors

$$\begin{aligned} M_j \frac{d}{dt} \tau_j &= \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r, \\ M_j \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j &= - \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r}, \\ M_j \frac{d}{dt} e_j &= -p_j \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r, \end{aligned} \tag{4.44}$$

où on rappelle que $e = E - \frac{|\mathbf{u}|^2}{2}$ est l'énergie interne du fluide. Dans ce cas, on a

$$\begin{aligned} M_j T_j \frac{d}{dt} s_j &= M_j \frac{d}{dt} e_j + p_j \frac{d}{dt} \tau_j, \\ &= 0. \end{aligned}$$

Cependant, une telle formulation ne permet pas d'avoir la conservation de l'énergie totale et peut donc apporter d'autres problèmes.

La troisième piste, étudiée à la section suivante, est l'hybridation de notre schéma avec GLACE ou EUCCLHYD à la manière d'un θ -schéma.

4.7 Inégalité entropique et θ -schéma

4.7.1 Présentation du schéma

Nous regardons dans cette partie la possibilité d'hybrider notre schéma avec GLACE ou EUCCLHYD à la manière d'un θ -schéma. Le but d'un tel procédé est d'améliorer les résultats donnés par notre schéma sur les cas qui posent problème (comme par exemple les cas tests de Saltzman et Sedov qui sont décrits au chapitre suivant) en essayant d'imposer l'inégalité entropique. Nous décrivons ici des schémas hybrides, où l'on va utiliser EUCCLHYD, sachant que la méthode est identique dans le cadre de l'utilisation du schéma

GLACE. On rappelle que le schéma EUCCLHYD peut s'écrire

$$\begin{aligned}
 M_j \frac{d}{dt} \tau_j &= \frac{1}{2} \sum_{r \sim j} (\mathbf{N}_{j,(r-,r)} + \mathbf{N}_{j,(r,r+)}) \cdot \mathbf{u}_r^E, \\
 M_j \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j &= -\frac{1}{2} \sum_{r \sim j} \left[p_{j,r}^- \mathbf{N}_{j,(r-,r)} + p_{j,r}^+ \mathbf{N}_{j,(r,r+)} \right], \\
 M_j \frac{d}{dt} E_j &= -\frac{1}{2} \sum_{r \sim j} \left[\left(p_{j,r}^- \mathbf{N}_{j,(r-,r)} + p_{j,r}^+ \mathbf{N}_{j,(r,r+)} \right) \cdot \mathbf{u}_r^E \right], \\
 \frac{d}{dt} \mathbf{x}_r &= \mathbf{u}_r^E,
 \end{aligned} \tag{4.45}$$

où les valeurs nodales sont calculées grâce à (3.39) et (3.41) et l'exposant E fait référence au solveur nodal du schéma EUCCLHYD. On rappelle que notre schéma, présenté au chapitre 3, se résume à

$$\begin{aligned}
 M_j \frac{d}{dt} \tau_j &= \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r}, \\
 M_j \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j &= - \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r}, \\
 M_j \frac{d}{dt} E_j &= - \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r, \\
 \frac{d}{dt} \mathbf{x}_r &= \mathbf{u}_r,
 \end{aligned} \tag{4.46}$$

où les valeurs nodales sont calculées grâce à (4.5) et (4.6). Notons

$$\begin{aligned}
 F_{\tau,j}^E &= \sum_{r \sim j} \mathbf{u}_r^E \cdot \mathbf{C}_{j,r}, \\
 \mathbf{F}_{\mathbf{u},j}^E &= -\frac{1}{2} \sum_{r \sim j} \left[p_{j,r}^- \mathbf{N}_{j,(r-,r)} + p_{j,r}^+ \mathbf{N}_{j,(r,r+)} \right], \\
 F_{E,j}^E &= -\frac{1}{2} \sum_{r \sim j} \left[\left(p_{j,r}^- \mathbf{N}_{j,(r-,r)} + p_{j,r}^+ \mathbf{N}_{j,(r,r+)} \right) \cdot \mathbf{u}_r^E \right], \\
 F_{\tau,j} &= \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r}, \\
 \mathbf{F}_{\mathbf{u},j} &= - \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r}, \\
 F_{E,j} &= - \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r,
 \end{aligned} \tag{4.47}$$

les flux correspondants à chaque schéma numérique. On propose alors de définir un θ -schéma par

$$\begin{aligned}
 M_j \frac{d}{dt} \tau_j &= \theta F_{\tau,j} + (1 - \theta) F_{\tau,j}^E, \\
 M_j \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j &= \theta \mathbf{F}_{\mathbf{u},j} + (1 - \theta) \mathbf{F}_{\mathbf{u},j}^E, \\
 M_j \frac{d}{dt} E_j &= \theta F_{E,j} + (1 - \theta) F_{E,j}^E, \\
 \frac{d}{dt} \mathbf{x}_r &= \theta \mathbf{u}_r + (1 - \theta) \mathbf{u}_r^E.
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

Nous espérons, en combinant notre schéma à EUCCLHYD, obtenir de meilleurs résultats pour les cas problématiques du chapitre suivant.

Remarquons qu'il n'est pas nécessaire de définir θ constant sur tout le maillage. En effet, il est possible de définir des θ_r locaux au niveau de chaque noeud. Le schéma qui en

découle, qu'on appellera hybride local, s'écrit alors

$$\begin{aligned}
 M_j \frac{d}{dt} \tau_j &= F_{\tau,j}^{hl}, \\
 M_j \frac{d}{dt} \mathbf{u}_j &= \mathbf{F}_{\mathbf{u},j}^{hl}, \\
 M_j \frac{d}{dt} E_j &= F_{E,j}^{hl}, \\
 \frac{d}{dt} \mathbf{x}_r &= \theta_r \mathbf{u}_r + (1 - \theta_r) \mathbf{u}_r^E,
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

avec

$$\begin{aligned}
 F_{\tau,j}^{hl} &= \sum_{r \sim j} [\theta_r \mathbf{u}_r + (1 - \theta_r) \mathbf{u}_r^E] \cdot \mathbf{C}_{j,r}, \\
 \mathbf{F}_{\mathbf{u},j}^{hl} &= - \sum_{r \sim j} \left[\theta_r p_r \mathbf{C}_{j,r} + (1 - \theta_r) \frac{p_{j,r}^- \mathbf{N}_{j,(r_-,r)} + p_{j,r}^+ \mathbf{N}_{j,(r,r_+)}}{2} \right], \\
 F_{E,j}^{hl} &= - \sum_{r \sim j} \left[\theta_r p_r \mathbf{u}_r \cdot \mathbf{C}_{j,r} + (1 - \theta_r) \frac{p_{j,r}^- \mathbf{N}_{j,(r_-,r)} + p_{j,r}^+ \mathbf{N}_{j,(r,r_+)}}{2} \cdot \mathbf{u}_r^E \right].
 \end{aligned} \tag{4.50}$$

Il reste maintenant à savoir comment choisir θ et θ_r . Nous comparerons au chapitre 5 plusieurs méthodes définissant trois schémas hybrides :

1. Définir à priori $\theta = 0.95$.
2. Définir un θ global maximal pour que l'inégalité entropique soit vérifiée.
3. Définir un θ_r local autour des noeuds "maximal" pour que l'inégalité entropique soit vérifiée.

Les deux dernières méthodes sont décrites dans la sous-section suivante.

4.7.2 θ -schéma et inégalité entropique

Rappelons que EUCLHYD vérifie l'inégalité entropique dans le sens où, pour toute cellule j , on a

$$\frac{d}{dt} s_j \geq 0. \tag{4.51}$$

Notons que la preuve de cette inégalité, faite par Maire [2009], repose sur l'égalité (3.48) que nous rappelons ici

$$M_j T_j \frac{d}{dt} s_j = \sum_{r \sim j} [A_{j,r}^E (\mathbf{u}_r^E - \mathbf{u}_j) \cdot (\mathbf{u}_r^E - \mathbf{u}_j)] \tag{4.52}$$

où T est la température et $A_{j,r}^E = \alpha_j \left[\frac{\mathbf{N}_{j,(r_-,r)} \otimes \mathbf{N}_{j,(r_-,r)}}{2|\mathbf{N}_{j,(r_-,r)}|} + \frac{\mathbf{N}_{j,(r,r_+)} \otimes \mathbf{N}_{j,(r,r_+)}}{2|\mathbf{N}_{j,(r,r_+)}|} \right]$ est symétrique définie positive. Rappelons que dans le cadre de notre schéma, on a vu que

$$M_j T_j \frac{d}{dt} s_j = \sum_{r \sim j} (p_r - p_j) (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_r) \cdot \mathbf{C}_{j,r}, \tag{4.53}$$

et qu'il est impossible de montrer que l'entropie croît. En fait, on peut même exhiber des cas où l'entropie décroît.

4.7.2.1 θ -schéma global

Dans le cadre du θ -schéma global (4.48), il est facile de montrer que

$$M_j T_j \frac{d}{dt} s_j = \theta \sum_{r \sim j} [(p_r - p_j) (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_r) \cdot \mathbf{C}_{j,r}] + (1 - \theta) \sum_{r \sim j} [A_{j,r}^E (\mathbf{u}_r^E - \mathbf{u}_j) \cdot (\mathbf{u}_r^E - \mathbf{u}_j)], \quad (4.54)$$

où le deuxième terme du membre de droite est toujours positif ou nul. Pour assurer l'inégalité entropique, en notant

$$\mathcal{E}_j = \left\{ \theta \in [0, 1], \sum_{r \sim j} [\theta (p_r - p_j) (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_r) \cdot \mathbf{C}_{j,r} + (1 - \theta) A_{j,r}^E (\mathbf{u}_r^E - \mathbf{u}_j) \cdot (\mathbf{u}_r^E - \mathbf{u}_j)] \geq 0 \right\}, \quad (4.55)$$

on peut choisir $\theta = \max_j (\max \mathcal{E}_j)$, ce qui assurera l'inégalité entropique.

4.7.2.2 θ -schéma local

Dans le cadre du θ -schéma où θ_r est défini localement au niveau de chaque noeud (4.49), on cherche pour chaque noeud, le θ_r maximal qui vérifie pour toute cellule j contenant le noeud r ,

$$\theta_r (p_r - p_j) (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_r) \cdot \mathbf{C}_{j,r} + (1 - \theta_r) A_{j,r}^E (\mathbf{u}_r^E - \mathbf{u}_j) \cdot (\mathbf{u}_r^E - \mathbf{u}_j) \geq 0. \quad (4.56)$$

En notant

$$\mathcal{E}_{r,j} = \{ \theta_r \in [0, 1], \theta_r (p_r - p_j) (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_r) \cdot \mathbf{C}_{j,r} + (1 - \theta_r) A_{j,r}^E (\mathbf{u}_r^E - \mathbf{u}_j) \cdot (\mathbf{u}_r^E - \mathbf{u}_j) \geq 0 \}, \quad (4.57)$$

il suffit de prendre $\theta_r = \max_{j \sim r} \mathcal{E}_{r,j}$ pour que l'inégalité entropique soit vérifiée.

4.8 Une modification du schéma

Remarquons que la seconde égalité de (4.4), $\int_0^{2\pi} \tilde{p}_r(\theta) \mathbf{n}_\theta d\theta = \mathbf{0}$, équivaut à imposer que la somme des forces autour du noeud est nulle. Cependant, en utilisant la seconde

loi de Newton, on s'attend plutôt à ce que la somme des forces soit égale à $M_r \mathbf{a}_r$, où M_r représente la masse du noeud et \mathbf{a}_r son accélération. On va, dans cette partie, proposer une modification du solveur nodal de manière à respecter cette loi.

Remarque 18 *Il n'est pas possible de faire une telle modification pour les schémas GLACE et EUCCLHYD précédemment présentés. En effet, la relation correspondante est nécessaire pour assurer la conservativité du schéma. Or, dans notre cas, cette relation n'est qu'un artefact permettant de mener le calcul des vitesses et pressions nodales.*

La question essentielle qui se pose ici est alors comment définir la masse du noeud M_r et son accélération \mathbf{a}_r ? Pour cela, nous allons légèrement modifier l'approche utilisée pour définir le solveur nodal.

Notons d_r une distance caractéristique située au noeud r (voir figure 4.4). On veut alors utiliser les relations

$$\begin{aligned} p(\theta) + \alpha(\theta) \mathbf{u}(\theta) \cdot \mathbf{n}_\theta &= \tilde{p}_r(\theta) + \alpha(\theta) \mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n}_\theta, \\ \int_{\theta=0}^{2\pi} \int_{r=d_r} \tilde{p}_r(\theta) \mathbf{n}_\theta r dr d\theta &= \left(\int_{\theta=0}^{2\pi} \int_{r=0}^{d_r} \rho(\theta) r dr d\theta \right) \mathbf{a}_r, \\ \int_{\theta=0}^{2\pi} \frac{1}{\alpha(\theta)} d\theta p_r &= \int_{\theta=0}^{2\pi} \frac{\tilde{p}_r(\theta)}{\alpha(\theta)} d\theta. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Remarque 19 *Nous ne changeons pas la relation permettant le calcul de la pression nodale. En effet, nous supposons que les variables utilisées dépendent uniquement de l'angle θ et non de la distance au noeud r . Intégrer la dernière égalité de (4.58) par rapport à la variable r ne changerait donc rien à cette relation.*

Dans la formulation précédente on a $M_r = \int_{\theta=0}^{2\pi} \int_{r=0}^{d_r} \rho(\theta) r dr d\theta$. Le point important est de savoir comment définir d_r . Pour le moment, supposons cette distance connue et regardons les modifications qu'imposent ce changement sur le solveur nodal. Notre intérêt se portera ici sur la vitesse nodale, le calcul de la pression nodale restant inchangé par rapport au solveur original. Le calcul de la vitesse nodale avec (4.58) se réduit à

$$\begin{aligned} A_r \mathbf{u}_r + \frac{M_r}{d_r} \mathbf{a}_r &= \mathbf{B}_r, \\ M_r &= \sum_{j \sim r} \theta_{j,r} \frac{d_r^2}{2} \rho_j, \end{aligned} \quad (4.59)$$

où les matrices A_r et \mathbf{B}_r sont identiques à celles présentées en (4.6). Il reste maintenant à définir les choix de d_r et \mathbf{a}_r .

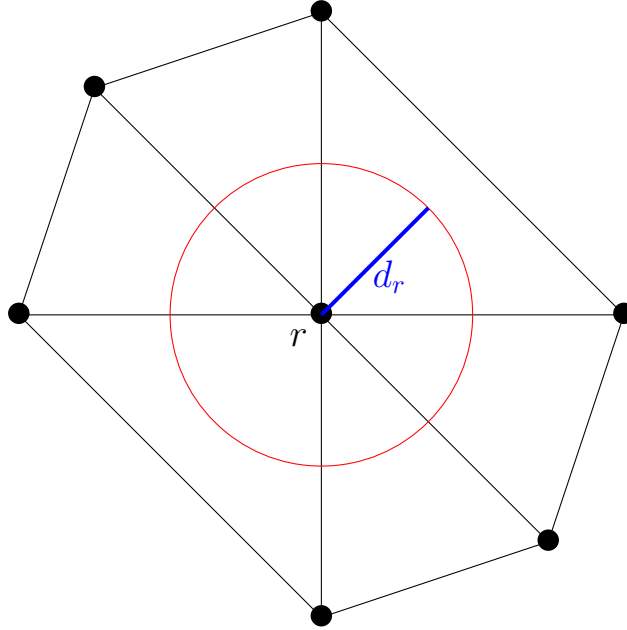


FIGURE 4.4 – Définition de la longueur d_r .

4.8.1 Choix du terme d'accélération

Nous choisissons de définir l'accélération au noeud r de la manière la plus simple possible. On pose donc

$$\mathbf{a}_r = \frac{\mathbf{u}_r^n - \mathbf{u}_r^{n-1}}{\delta t^n}, \quad (4.60)$$

où δt^n est le pas de temps à l'instant n , défini tel que $t^{n+1} = t^n + \delta t^n$.

4.8.2 Choix de la distance d_r .

Dans cette partie, nous expliquons comment choisir d_r . Notons

$$\delta x_r = \min_{s \sim r} (|\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_s|). \quad (4.61)$$

Afin de ne pas empiéter sur des cellules non adjacentes au noeud r , il est nécessaire de prendre $d_r \leq \delta x_r$. Pour cela, nous choisissons (comme dans la figure 4.4)

$$d_r = C_r \delta x_r, \quad (4.62)$$

où $C_r \in [0, 1]$ est une constante.

Nous avons remarqué numériquement que prendre $C_r \geq 0.8$ entraîne la propagation d'oscillations au niveau des chocs qui détruisent la solution. Pour les applications numériques (voir chapitre 5), nous travaillerons essentiellement avec $C_r \in \left[0.5, \frac{\sqrt{2}}{2}\right]$. On peut voir figure 4.5 l'influence du choix de C_r sur le domaine d'intégration. Sur un maillage

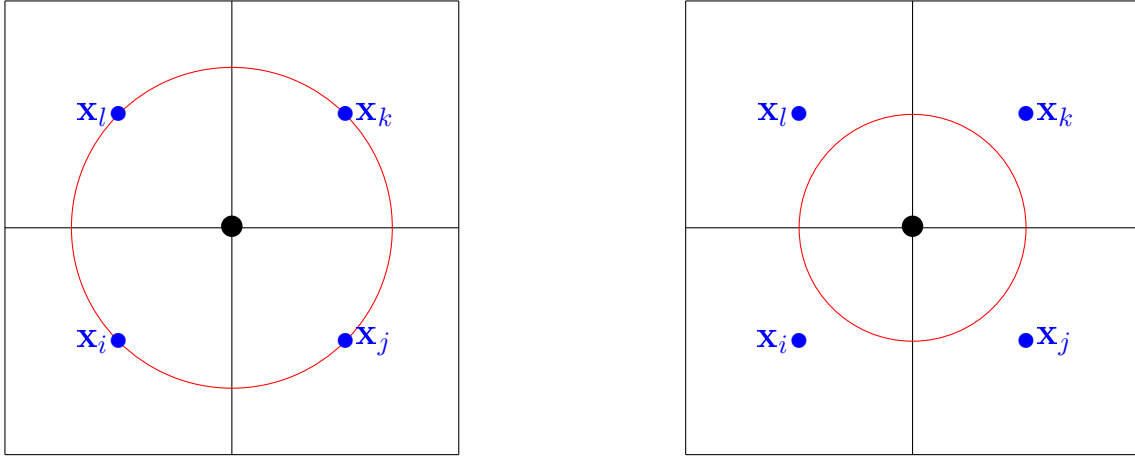
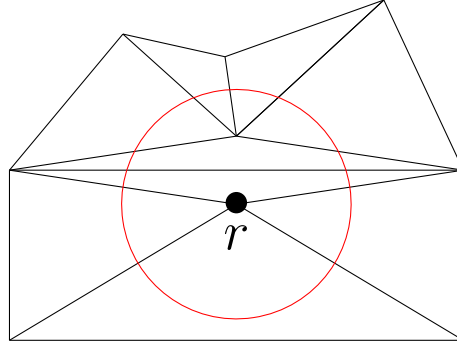


FIGURE 4.5 – Choix du coefficient C_r .

cartésien, le choix de $C_r = \frac{\sqrt{2}}{2}$ correspond à considérer le cercle passant par les centres des cellules adjacentes. Dans ce cas, les cercles considérés pour deux noeuds voisins peuvent avoir une intersection non vide. Le choix $C_r = 0.5$, quant à lui, correspond à considérer les cercles passant par le centre des arêtes. Ici, les cercles considérés autour de deux noeuds adjacents ne peuvent pas s'intersecter. Nous regarderons au chapitre 5, l'influence du choix de la constante C_r .

Remarque 20 *En pratique, comme on peut le voir à la figure 4.6, la condition sur la distance aux noeuds voisins n'est pas suffisante pour assurer que le disque de rayon d_r centré au noeud r n'intersecte pas de mailles ne contenant pas le noeud r . Pour assurer que cela soit vérifié et que la notion de répartition angulaire des variables physiques autour du noeud fasse sens, on impose de plus que ce disque soit contenu dans l'union des mailles voisines du noeud r . Pour cela, on peut simplement imposer*

$$d_r = \min \left\{ C_r \delta x_r, \min_{j \sim r} \left(\min_{\substack{e \sim j \\ r \notin e}} (dist(\mathbf{x}_r, e)) \right) \right\}, \quad (4.63)$$


 FIGURE 4.6 – Choix de $d_r = 0.5\delta x_r$ sur un maillage déformé.

où e représente une arête et $\text{dist}(\mathbf{x}_r, e)$ correspond à la distance du noeud \mathbf{x}_r à l'arête e .

4.8.3 Reformulation du solveur nodal

Le choix de l'expression de l'accélération \mathbf{a}_r et de la distance d_r étant fait, on peut maintenant réécrire le solveur nodal modifié sous la forme

$$\begin{aligned} \left(A_r + \frac{M_r}{d_r \delta t^n} I \right) \mathbf{u}_r^n &= \mathbf{B}_r + \frac{M_r}{d_r \delta t^n} \mathbf{u}_r^{n-1}, \\ M_r &= \sum_{j \sim r} \frac{d_r^2}{2} \theta_{j,r} \rho_j. \end{aligned} \quad (4.64)$$

où les matrices A_r et \mathbf{B}_r sont celles calculées en (4.6) et I correspond à la matrice identité. La pression nodale reste inchangée par rapport au solveur original.

Remarque 21 *Le système précédent est inversible. En effet, on a vu que A_r est une matrice symétrique définie positive. Donc $A_r + \frac{M_r}{d_r \delta t^n} I$ l'est aussi, ce qui assure que le système admette une unique solution.*

4.8.4 Lien avec le solveur original

Nous cherchons maintenant à étudier le lien entre le solveur nodal de départ et celui proposé dans cette section.

Proposition 15 *Soit $d \in [0, \delta x_r]$, où $\delta x_r = \min_{s \sim r} (|\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_s|)$. Soit (\mathbf{u}_r^d) la suite des vitesses étant solutions de*

$$\begin{aligned} \left(A_r + \frac{M_r^d}{d \delta t} I \right) \mathbf{u}_r^d &= \mathbf{B}_r + \frac{M_r^d}{d \delta t} \mathbf{u}_r^{n-1}, \\ M_r^d &= \sum_{j \sim r} \frac{d^2}{2} \theta_{j,r} \rho_j. \end{aligned}$$

Alors $\lim_{d \rightarrow 0} \mathbf{u}_r^d = \mathbf{u}_r$ où \mathbf{u}_r est solution de

$$A_r \mathbf{u}_r = \mathbf{B}_r.$$

Démonstration. Pour prouver cette proposition, il suffit de remarquer que

$$\frac{M_r^d}{d} = \sum_{j \sim r} \frac{d}{2} \theta_{j,r} \rho_j.$$

Il est alors clair que

$$\begin{aligned} \lim_{d \rightarrow 0} \left(A_r + \frac{M_r^d}{d\delta t} I \right)^{-1} &= A_r, \\ \lim_{d \rightarrow 0} \frac{M_r^d}{d\delta t} \mathbf{u}_r^{n-1} &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Donc

$$\lim_{d \rightarrow 0} \mathbf{u}_r^d = \lim_{d \rightarrow 0} \left[\left(A_r + \frac{M_r^d}{d\delta t} I \right)^{-1} \left(\mathbf{B}_r + \frac{M_r^d}{d\delta t} \mathbf{u}_r^{n-1} \right) \right] = A_r^{-1} \mathbf{B}_r.$$

Ce qui conclut la preuve. □

Remarque 22 *En fait, le solveur original présenté en (4.4) traite le noeud comme un point de masse nulle. Dans ce cas, le terme correspondant à l'accélération disparaît.*

4.9 Extension à l'ordre 2

Dans cette partie, nous étudions une extension à l'ordre 2 du schéma numérique. Cette extension est faite de manière classique. Dans un premier temps, une reconstruction linéaire des variables dans les mailles est faite. Puis, on utilise une méthode de type Runge-Kutta d'ordre deux pour la discrétisation temporelle d'une manière similaire à ce que propose Maire et Nkonga [2009].

4.9.1 Reconstruction linéaire

4.9.1.1 Reconstruction du gradient

Nous expliquons ici comment faire une reconstruction linéaire des variables dans les mailles. Considérons ω une variable du fluide (la pression p ou une des composantes de la

vitesse \mathbf{u}). On suppose que ω est linéaire dans chaque cellule Ω_j . On définit donc, pour tout $\mathbf{x} \in \Omega_j$

$$\omega_j(\mathbf{x}) = \omega_j + \nabla\omega_j \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_j), \quad (4.65)$$

où $\mathbf{x}_j = \frac{1}{V_j} \int_{\Omega_j} \mathbf{x} d\mathbf{x}$ est le centre de la maille Ω_j et ω_j est la valeur moyenne de ω dans cette maille. Notre schéma numérique nous donne à priori cette valeur moyenne ω_j . Il nous reste donc à définir le gradient $\nabla\omega_j$. La reconstruction de ce gradient peut se faire de plusieurs manières : avec des méthodes de type ENO [Cheng et Shu 2014a], WENO [Cheng et Shu 2014b] ou des méthodes de type moindres carrés [Barth et Jespersen 1989]. Nous avons choisi, dans le cadre de cette thèse, d'utiliser cette dernière méthode. On cherche donc le gradient tel que

$$\forall k \in V(j), \omega_j(\mathbf{x}_k) = \omega_k, \quad (4.66)$$

où on rappelle que $V(j)$ correspond aux cellules voisines de j . Le système d'équations défini par ces relations étant, en général, sur-déterminé, on le résout en utilisant une méthode des moindres carrés.

$$\nabla\omega_j = \operatorname{argmin} \sum_{k \in V(j)} [\omega_k - \omega_j - \nabla\omega_j \cdot (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j)]^2. \quad (4.67)$$

Proposition 16 *Considérons le problème de minimisation*

$$\nabla\omega_j = \operatorname{argmin} \sum_{k \in V(j)} [\omega_k - \omega_j - \nabla\omega_j \cdot (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j)]^2. \quad (4.68)$$

Alors

$$\begin{aligned} \nabla\omega_j &= A_j^{-1} \sum_{k \in V(j)} (\omega_k - \omega_j) (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j), \\ A_j &= \sum_{k \in V(j)} (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j) \otimes (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j). \end{aligned} \quad (4.69)$$

Démonstration. Notons $f(x, y) = \sum_{k \in V(j)} \left[\omega_k - \omega_j - \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \cdot (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j) \right]^2$. On a alors

$$\begin{aligned} \nabla f(x, y) &= \sum_{k \in V(j)} \left[\omega_k - \omega_j - \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \cdot (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j) \right] (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j), \\ &= \sum_{k \in V(j)} [(\omega_k - \omega_j) (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j)] - A_j \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

avec $A_j = \sum_{k \in V(j)} (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j) \otimes (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j)$. D'où

$$\nabla f(x, y) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = A_j^{-1} \sum_{k \in V(j)} (\omega_k - \omega_j) (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j).$$

De plus, il est clair que, de par la forme de f , ce point est le minimum. \square

4.9.1.2 Limiteur

Une fois le gradient calculé, il faut le limiter pour préserver la monotonie. On introduit un limiteur $\nu_j \in [0, 1]$ et on remplace $\mathbf{x} \rightarrow \omega_j(\mathbf{x})$ par

$$\omega_j^{lim}(\mathbf{x}) = \omega_j + \nu_j \nabla \omega_j \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_j). \quad (4.70)$$

Il faut alors choisir ν_j pour que

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega_j, \omega_j^{min} \leq \omega_j^{lim}(\mathbf{x}) \leq \omega_j^{max}, \quad (4.71)$$

avec $\omega_j^{min} = \min_{k \in V(j)} (\omega_k)$ et $\omega_j^{max} = \max_{k \in V(j)} (\omega_k)$. L'idée étant que la reconstruction linéaire de ω_j reste dans l'intervalle donné par les valeurs moyennes de ω sur les mailles voisines.

Proposition 17 *Considérons la reconstruction linéaire d'une variable ω_j dans la cellule Ω_j , $\mathbf{x} \rightarrow \omega_j^{lim}(\mathbf{x})$. Alors les deux conditions suivantes sont équivalentes :*

1. $\forall \mathbf{x} \in \Omega_j, \omega_j^{min} \leq \omega_j^{lim}(\mathbf{x}) \leq \omega_j^{max},$
2. $\forall r \sim j, \omega_j^{min} \leq \omega_j^{lim}(\mathbf{x}_r) \leq \omega_j^{max}.$

Démonstration. La reconstruction étant linéaire la proposition est évidente. \square

Définissons alors le limiteur avec

$$\nu_j = \min_{r \sim j} \nu_{j,r},$$

$$\nu_{j,r} = \begin{cases} \mu \left(\frac{\omega_j^{max} - \omega_j}{\omega_j(\mathbf{x}_r) - \omega_j} \right) & \text{si } \omega_j(\mathbf{x}_r) - \omega_j > 0, \\ \mu \left(\frac{\omega_j^{min} - \omega_j}{\omega_j(\mathbf{x}_r) - \omega_j} \right) & \text{si } \omega_j(\mathbf{x}_r) - \omega_j < 0, \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.72)$$

Ici μ est une fonction qui caractérise le limiteur. On prendra pour nos application numérique $\mu(x) = \frac{x+2x}{x^2+x+2}$, ce qui correspond au limiteur développé par Venkatakrishnan [1995].

D'autres choix de μ sont possibles comme on peut le voir dans la référence ci-dessus. Par exemple, en prenant $\mu(x) = \min(1, x)$, on obtient le limiteur décrit par Barth et Jespersen [1989].

Nous utilisons maintenant, comme Maire et Nkonga [2009], dans le cadre du schéma du second ordre, les valeurs interpolées aux noeuds dans le solveur nodal (4.5) plutôt que les valeurs moyennes. Cela permet d'obtenir un schéma d'ordre deux en espace. Il faut maintenant déterminer comment discrétiser la dérivée temporelle.

4.9.2 Discrétisation temporelle

Dans cette partie, nous décrivons la discrétisation temporelle faite à l'aide d'une méthode de type Runge-Kutta. Celle-ci permettra d'obtenir un schéma d'ordre deux en temps. Supposons qu'on connaisse les variables au temps t^n . On cherche à les calculer au temps $t^{n+1} = t^n + \delta t^n$. La méthode de Runge-Kutta se décompose en deux étapes. La première est dite de prédiction et la seconde de correction.

4.9.2.1 Étape de prédiction

- Calculer les valeurs nodales \mathbf{u}_r^n et p_r^n avec notre solveur nodal (4.5) en utilisant les valeurs interpolées aux noeuds avec la reconstruction linéaire de la partie 4.9.1.
- Calculer les normales nodales $\mathbf{C}_{j,r}^n$ à l'instant t^n et mettre à jour la vitesse et l'énergie totale à l'instant $t^{n+\frac{1}{2}} = t^n + \frac{\delta t^n}{2}$ avec

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_j^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{u}_j^n - \frac{\delta t^n}{2M_j} \sum_{r \sim j} p_r^n \mathbf{C}_{j,r}^n, \\ E_j^{n+\frac{1}{2}} &= E_j^n - \frac{\delta t^n}{2M_j} \sum_{r \sim j} p_r^n \mathbf{C}_{j,r}^n \cdot \mathbf{u}_r^n. \end{aligned}$$

- Calculer la position des noeuds à l'instant $t^{n+\frac{1}{2}}$

$$\mathbf{x}_r^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{x}_r^n + \frac{\delta t^n}{2} \mathbf{u}_r^n.$$

- Mettre à jour les densités avec la conservation de la masse

$$\rho_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{V_j^n}{V_j^{n+\frac{1}{2}}} \rho_j^n.$$

4.9.2.2 Étape de correction

Supposons maintenant l'étape de prédiction effectuée et les valeurs au temps $t^{n+\frac{1}{2}}$ connues. L'étape de correction s'effectue de la manière suivante :

- Calculer les valeurs nodales $\mathbf{u}_r^{n+\frac{1}{2}}$ et $p_r^{n+\frac{1}{2}}$ avec le solveur nodal en utilisant les valeurs interpolées au noeud à l'instant $t^{n+\frac{1}{2}}$.
- Calculer les normales nodales $\mathbf{C}_{j,r}^{n+\frac{1}{2}}$ à l'instant $t^{n+\frac{1}{2}}$ et mettre à jour la vitesse et l'énergie totale avec

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_j^{n+1} &= \mathbf{u}_j^n - \frac{\delta t^n}{M_j} \sum_{r \sim j} p_r^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{C}_{j,r}^{n+\frac{1}{2}}, \\ E_j^{n+1} &= E_j^n - \frac{\delta t^n}{M_j} \sum_{r \sim j} p_r^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{C}_{j,r}^{n+\frac{1}{2}} \cdot \mathbf{u}_r^{n+\frac{1}{2}}.\end{aligned}$$

- Calculer la position des noeuds à l'instant t^{n+1}

$$\mathbf{x}_r^n = \mathbf{x}_r^n + \delta t^n \mathbf{u}_r^{n+\frac{1}{2}}.$$

- Mettre à jour les densités

$$\rho_j^{n+1} = \frac{V_j^n}{V_j^{n+1}} \rho_j^n.$$

Remarque 23 *Cette extension à l'ordre deux n'est pas dépendante du solveur nodal et peut donc être appliquée à d'autres schémas numériques. En particulier, il est possible d'appliquer cette extension aux schémas GLACE ou EUCCLHYD.*

Chapitre 5

Comparaison des schémas

Dans ce chapitre, nous appliquons nos schémas à différents cas tests pour valider le bon fonctionnement de ceux-ci. Les schémas présentés au chapitre 3 sont comparés aux schémas GLACE et EUCCLHYD présentés au chapitre 2.

Nous tenons à rappeler au lecteur que notre but est d'obtenir un schéma permettant la simulation de l'explosion vapeur. Nous cherchons donc, à travers ces cas tests, à mettre en avant le fait que le schéma numérique développé au chapitre 3 soit adapté à une telle application.

5.1 Tests unidimensionnels

Dans un premier temps, nous regardons quelques cas unidimensionnels ne traitant qu'un unique gaz parfait. Ces premiers tests sont indispensables pour montrer le bon comportement du schéma et vérifier le bon fonctionnement des conditions aux bords.

Nous précisons cependant que notre schéma original, GLACE et EUCCLHYD, se ramènent essentiellement au schéma acoustique en dimension un.

5.1.1 Tube à choc de Sod

Premièrement, nous regardons le cas du tube à choc de Sod [1978]. Ce cas est un simple problème de Riemann impliquant un gaz parfait de constante adiabatique $\gamma = 1.4$. Le tube

à choc est une boîte de dimension $[0, 1] \times [0, 1]$ où le gaz parfait est initialement défini par

$$(\rho, u, p)(t = 0, x) = \begin{cases} (1, 0, 1) & \text{si } x < 0.5, \\ (0.125, 0, 0.1) & \text{si } x > 0.5. \end{cases}$$

Les bords du domaine sont naturellement considérés comme des murs glissants. Rappelons que ce cas étant un problème de Riemann, la solution exacte peut être facilement calculée (voir [Godlewski et Raviart 2013; Toro 2013] par exemple).

5.1.1.1 Sur maillage cartésien

Tout d’abord, nous regardons ce problème sur un maillage cartésien. Dans ce cas, notre schéma non modifié, GLACE et EUCCLHYD se ramènent essentiellement à un schéma acoustique. Nous ne comparons donc pas ces schémas sur ce cas, mais nous nous contentons de comparer notre schéma original, le schéma modifié, et l’extension à l’ordre 2. Les résultats sont regardés au temps final $T = 0.1$.

Observons d’abord l’influence du choix du paramètre C_r défini en (4.62) sur le schéma modifié à la figure 5.1. Nous utilisons, pour ce premier test, un maillage 400×3 . Le choix d’utiliser 3 mailles horizontales et non une seule permet de vérifier que les conditions aux bords de type murs fonctionnent bien. On peut voir que plus C_r est proche de 0, plus la solution numérique est proche de la solution obtenue avec le schéma sans modification. Cette observation confirme bien la proposition 15. D’autre part, on remarque aussi que les résultats numériques obtenus avec cette modification ont les mêmes marqueurs que les schémas d’ordre 2 : on obtient un *overshoot* au niveau du choc et une amélioration de la précision dans les détente. On peut aussi voir que pour $C_r = 0.7$, l’*overshoot* est important. Ainsi, un choix trop élevé pour C_r peut entraîner la propagation d’oscillations au niveau du choc. Nous choisirons donc, dans la suite, d’utiliser $C_r = 0.5$, ce qui correspond au cas où les domaines d’intégration autour de noeuds voisins ne s’intersectent pas.

Nous voulons maintenant comparer le schéma original, le schéma modifié et l’extension à l’ordre 2. Pour cela, nous traçons la pression obtenue pour ces trois schémas numériques sur un maillage 400×3 sur la figure 5.2. Malgré l’amélioration des résultats permise par le schéma modifié, l’extension à l’ordre 2 du schéma reste meilleure. Le schéma modifié donne des résultats en terme d’erreur intermédiaire au schéma classique et à son extension

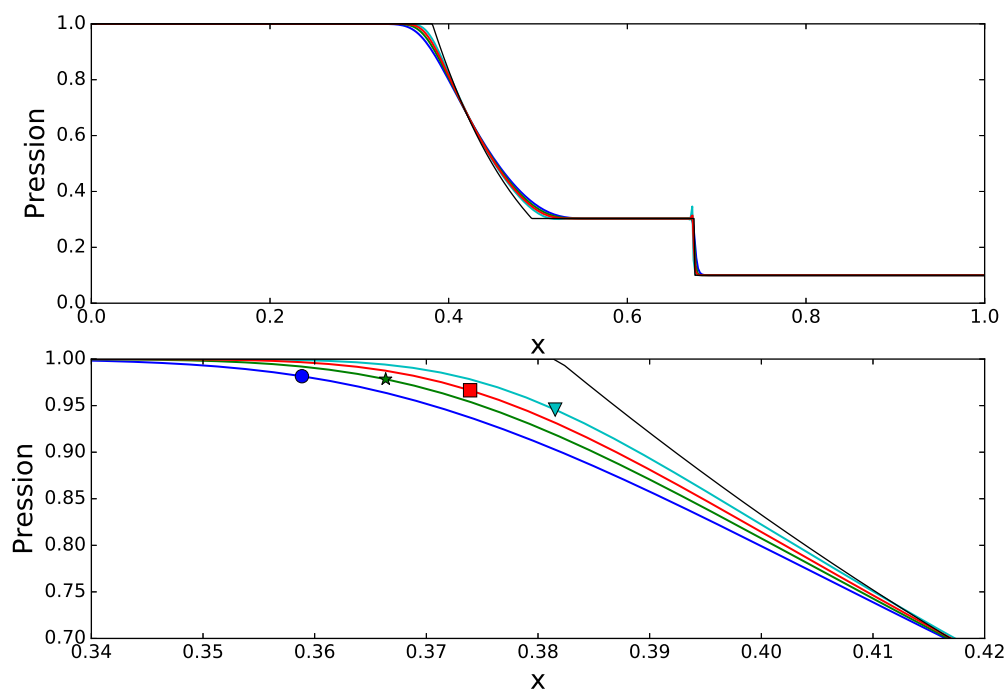


FIGURE 5.1 – Tube à choc de Sod. Influence de C_r sur les résultats. Profil de pression (haut) et zoom sur la détente (bas) pour $C_r = 0.3$ (\star), $C_r = 0.5$ (\blacksquare), $C_r = 0.7$ (\blacktriangledown), le schéma non modifié (\bullet) et solution exacte au temps $t = 0.1$.

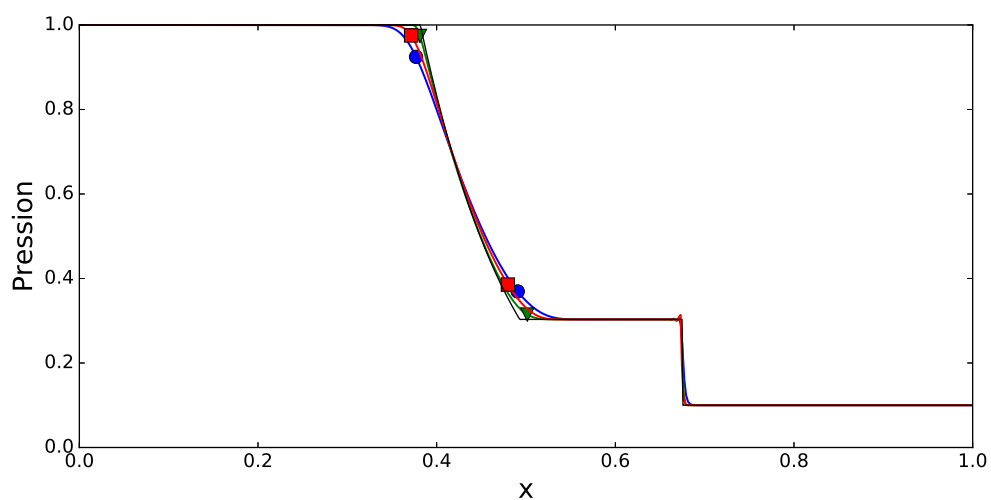


FIGURE 5.2 – Tube à choc de Sod. Profil de pression pour le schéma non modifié (\bullet), le schéma modifié avec $C_r = 0.5$ (\blacksquare), le schéma à l'ordre 2 (\blacktriangledown) et solution exacte au temps $t = 0.1$.

5.1. TESTS UNIDIMENSIONNELS

TABLE 5.1 – Tube à choc de Sod. Convergence pour le schéma non modifié.

| Maillage | Lieu | u_{err} | p_{err} | ρ_{err} | Lieu | u_{err} | p_{err} | ρ_{err} |
|-------------------|------|----------------|----------------|----------------|---------|----------------|----------------|----------------|
| M_1 | Tout | 2.67E-3 | 1.62E-3 | 1.65E-3 | Détente | 2.40E-3 | 1.57E-3 | 1.34E-3 |
| M_2 | Tout | 1.46E-3 | 9.08E-4 | 9.32E-4 | Détente | 1.35E-3 | 8.85E-4 | 7.57E-4 |
| M_3 | Tout | 1.04E-3 | 6.44E-4 | 6.65E-4 | Détente | 9.61E-4 | 6.29E-4 | 5.39E-4 |
| M_4 | Tout | 8.12E-4 | 5.04E-4 | 5.22E-4 | Détente | 7.53E-4 | 4.92E-4 | 4.22E-4 |
| Convergence order | | ≈ 0.85 | ≈ 0.85 | ≈ 0.84 | | ≈ 0.85 | ≈ 0.85 | ≈ 0.85 |

TABLE 5.2 – Tube à choc de Sod. Convergence pour le schéma modifié.

| Maillage | Lieu | u_{err} | p_{err} | ρ_{err} | Lieu | u_{err} | p_{err} | ρ_{err} |
|-------------------|------|----------------|----------------|----------------|---------|----------------|----------------|----------------|
| M_1 | Tout | 1.32E-3 | 8.25E-4 | 8.44E-4 | Détente | 1.19E-3 | 7.98E-4 | 6.87E-4 |
| M_2 | Tout | 7.24E-4 | 4.52E-4 | 4.68E-4 | Détente | 3.80E-4 | 4.41E-4 | 3.80E-4 |
| M_3 | Tout | 5.09E-4 | 3.17E-4 | 3.30E-4 | Détente | 4.67E-4 | 3.10E-4 | 2.68E-4 |
| M_4 | Tout | 3.95E-4 | 2.46E-4 | 2.57E-4 | Détente | 3.64E-5 | 2.41E-4 | 2.08E-4 |
| Convergence order | | ≈ 0.87 | ≈ 0.88 | ≈ 0.87 | | ≈ 0.87 | ≈ 0.87 | ≈ 0.87 |

à l'ordre 2 sur ce maillage.

Pour confirmer ces observations, nous effectuons une étude de la vitesse de convergence. Soit ω une variable du fluide. On note ω_j la valeur de cette variable dans la cellule j et ω_j^{ex} la valeur de la solution exacte au centre de gravité de la cellule j . On note δx_j la longueur de la cellule j (le test étant ici unidimensionnel, la définition de la longueur de la cellule ne pose pas de problème). On définit alors l'erreur L^1 par

$$\omega_{err} = \sum_j |\omega_j - \omega_j^{ex}| \delta x_j.$$

On considère quatre maillages : $M_1 = 10000 \times 3$, $M_2 = 20000 \times 3$, $M_3 = 30000 \times 3$ et $M_4 = 40000 \times 3$. Nous regardons les erreurs L^1 commises sur la totalité du domaine et sur un sous domaine ne contenant que l'onde de détente. Ces erreurs sont reportées dans les tableaux 5.1, 5.2 et 5.3.

Nous remarquons que le schéma original et le schéma modifié sont proches en terme de vitesse de convergence, même si celle-ci semble très légèrement améliorée avec la prise en compte de l'accélération dans le schéma. Cependant, nous constatons que l'erreur L^1 est diminuée par deux grâce à la prise en compte du principe fondamental de la dynamique.

5.1. TESTS UNIDIMENSIONNELS

TABLE 5.3 – Tube à choc de Sod. Convergence pour le schéma à l'ordre 2.

| Maillage | Lieu | u_{err} | p_{err} | ρ_{err} | Lieu | u_{err} | p_{err} | ρ_{err} |
|-------------------|------|----------------|----------------|----------------|---------|-------------|-------------|--------------|
| M_1 | Tout | 3.43E-4 | 1.73E-4 | 1.92E-4 | Détente | 2.43E-4 | 1.01E-4 | 1.31E-4 |
| M_2 | Tout | 1.74E-4 | 8.69E-5 | 9.93E-5 | Détente | 1.21E-4 | 5.04E-5 | 6.57E-5 |
| M_3 | Tout | 1.19E-4 | 5.83E-5 | 6.84E-5 | Détente | 8.09E-5 | 3.36E-5 | 4.38E-5 |
| M_4 | Tout | 9.25E-5 | 4.29E-5 | 5.31E-5 | Détente | 6.06E-4 | 2.51E-5 | 3.28E-5 |
| Convergence order | | ≈ 0.88 | ≈ 0.95 | ≈ 0.88 | | ≈ 1 | ≈ 1 | ≈ 1 |

Enfin, on peut voir que les vitesses de convergence calculées sur la totalité du domaine ou seulement sur la partie du domaine contenant la détente sont identiques. Ces schémas sont d'ordre un.

Par contre, nous remarquons que non seulement l'extension à l'ordre deux diminue très nettement l'erreur mais améliore aussi la vitesse de convergence. Cette vitesse est encore meilleure sur la détente, ce qui correspond aux résultats attendus.

5.1.1.2 Sur maillage triangulaire

Nous voulons maintenant reproduire un cas test illustrant la remarque faite à la section 3.4. On considère donc toujours le problème unidimensionnel du tube à choc de Sod tout en utilisant un maillage triangulaire. Le maillage est simplement un maillage cartésien où chaque maille est coupée en deux.

On cherche ici à regarder si la symétrie unidimensionnelle du problème est conservée. Pour cela, on observe la seconde composante de la vitesse qui, le test étant unidimensionnel, doit être nulle.

On remarque sur la figure 5.3 que nos deux schémas donnent des vitesses orthogonales au choc nulles, ce qui n'est pas le cas pour les schémas GLACE et EUCCLHYD. En effet, la dépendance des solveurs nodaux de GLACE et EUCCLHYD à des longueurs caractéristiques de mailles entraîne l'apparition d'erreur sur la direction des vitesses. Ce résultat illustre la remarque faite à la section 3.4 et le théorème 2 de la section 4.3 qui nous dit que nos schémas donnent toujours la bonne direction de la vitesse dans le cas de problèmes de Riemann unidimensionnels lorsque le maillage est aligné avec le choc.

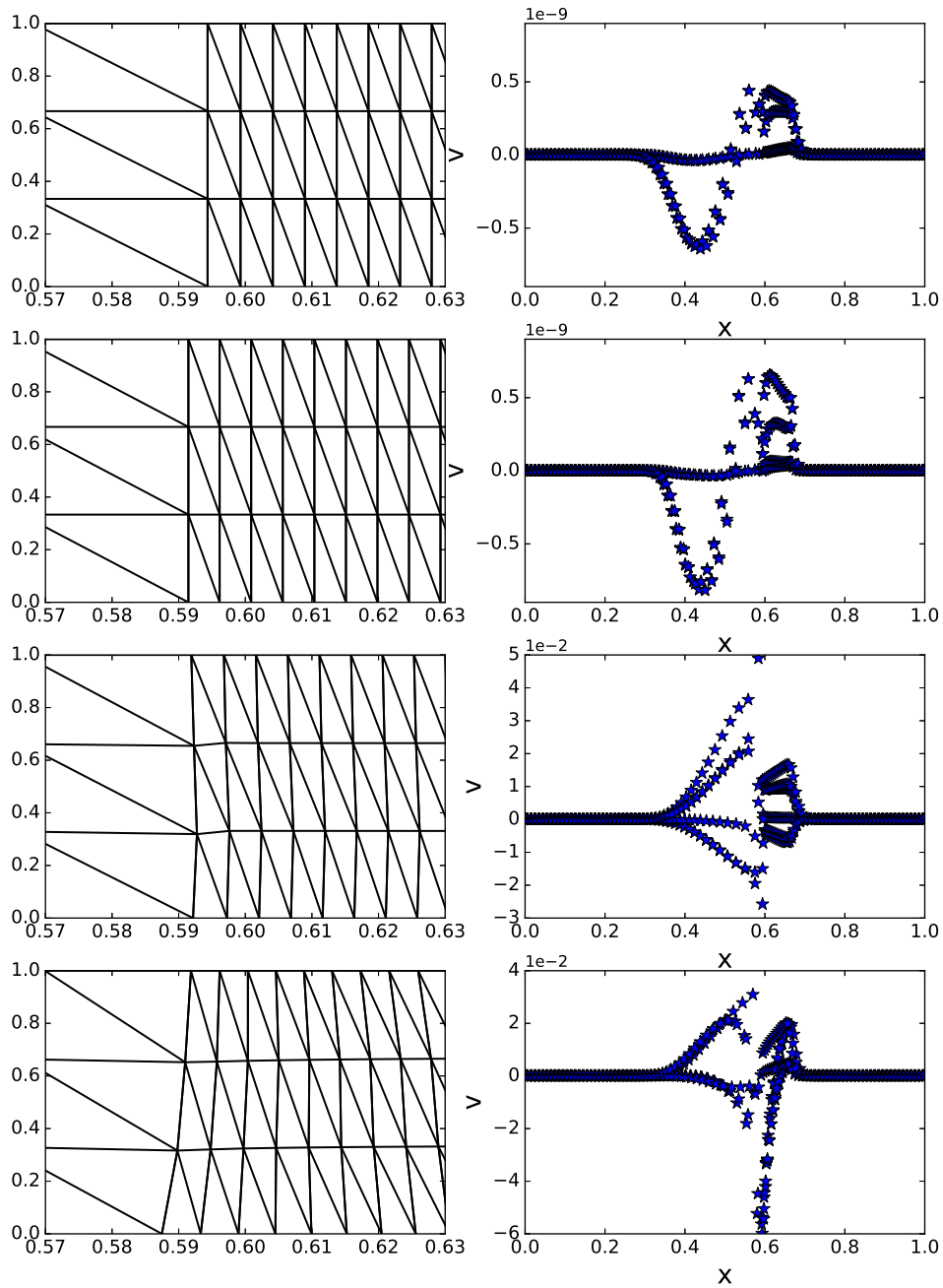


FIGURE 5.3 – Tube à choc de Sod. Zoom sur le maillage (gauche) et profil de la seconde composante de la vitesse (droite) pour (de haut en bas) notre schéma original, le schéma modifié , GLACE et EUCCLHYD au temps $t = 0.1$.

Précisons que l'extension à l'ordre 2 de notre schéma introduit une dépendance aux longueurs des mailles, et donc ne permettrait pas, sur ce cas, d'obtenir une vitesse nulle.

5.1.1.3 Sur un maillage triangulaire général

Nous nous intéressons maintenant au comportement de notre schéma sur un maillage triangulaire général. Le domaine considéré et l'initialisation du problème sont les mêmes que pour les cas précédents. Le maillage est triangulaire et généré grâce à Gmsh, seule l'interface est imposée. Le maillage initial est tracé sur la figure 5.4.

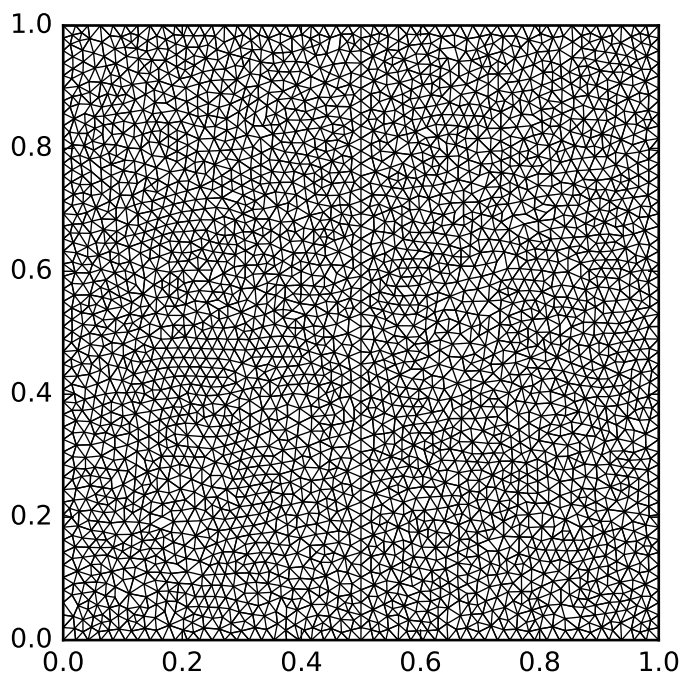


FIGURE 5.4 – Tube à choc de Sod. Maillage triangulaire général initial.

On trace sur la figure 5.5 un zoom sur le maillage au niveau de la discontinuité de contact et la seconde composante des vitesses nodales. On remarque sur cette figure que l'erreur globale commise sur la deuxième composante de la vitesse est légèrement plus faible avec notre schéma. On voit aussi sur les maillages que la discontinuité de contact est mieux préservée avec notre schéma. De plus, on trace sur la figure 5.6, l'évolution des

5.1. TESTS UNIDIMENSIONNELS

deux composantes de la vitesse d'un point de la discontinuité de contact en fonction du temps. On observe alors que l'erreur commise sur la seconde composante de la vitesse est bien plus faible avec notre schéma.

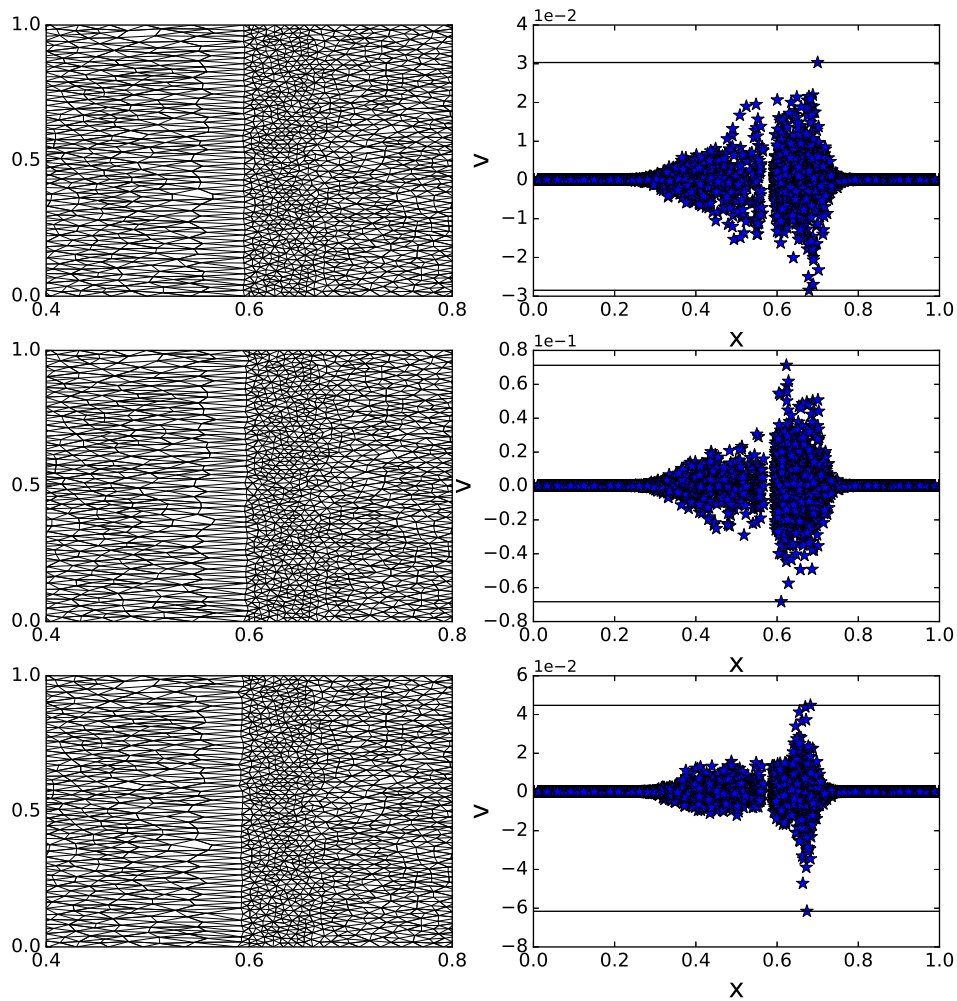


FIGURE 5.5 – Tube à choc de Sod sur un maillage général. Zoom sur le maillage (gauche) et profil de la deuxième composante de la vitesse nodale (droite) au temps $t = 0.1$ pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas).

Pour conclure sur ce cas test, nous avons observé que notre schéma permettait d'obtenir la bonne direction du champ de vitesse lorsque le maillage est aligné avec le choc. De plus,

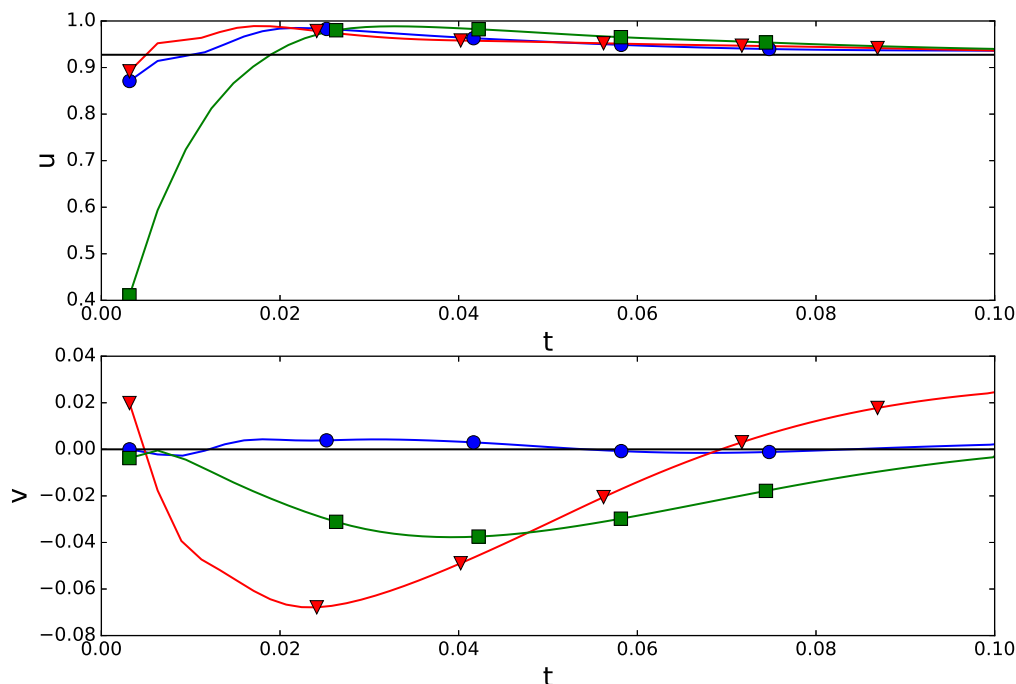


FIGURE 5.6 – Tube à choc de Sod sur un maillage général. Évolution de la première (haut) et seconde (bas) composante de la vitesse au niveau d’un noeud de la discontinuité de contact en fonction du temps pour notre schéma (●), GLACE (▼), EUCCLHYD (■) et solution analytique.

lorsque le maillage n’est plus aligné avec le choc, notre schéma permet de réduire les erreurs de symétries, notamment au niveau de la discontinuité de contact.

5.1.2 Tube à choc de Leblanc

Nous considérons ici aussi un cas de tube à choc unidimensionnel. Le cas test de Leblanc, qu’on peut trouver dans [Vilar et al. 2016a], est connu pour poser des problèmes aux codes Lagrangiens. Dans le cadre de ce cas test, nous observons l’influence de la modification suggérée en (4.11) permettant d’obtenir le solveur acoustique pour les problèmes unidimensionnels. Nous appelons, dans cette partie, le schéma prenant en compte cette modification, le schéma A. De la même manière, le schéma A modifié correspond au schéma A prenant en compte le principe fondamental de la dynamique.

Le tube à choc est un domaine de dimension $[0, 9] \times [0, 1]$ rempli par un gaz parfait de

5.1. TESTS UNIDIMENSIONNELS

constante adiabatique $\gamma = \frac{5}{3}$ dont l'état initial est donné par

$$(\rho, u, E)(t = 0, x) = \begin{cases} (1, 0, 0.1) & \text{si } x < 3, \\ (10^{-3}, 0, 10^{-7}) & \text{si } x > 3. \end{cases}$$

Dans un premier temps, considérons un maillage 500×3 . La densité et la pression au temps $t = 6$ sont tracées sur la figure 5.7.

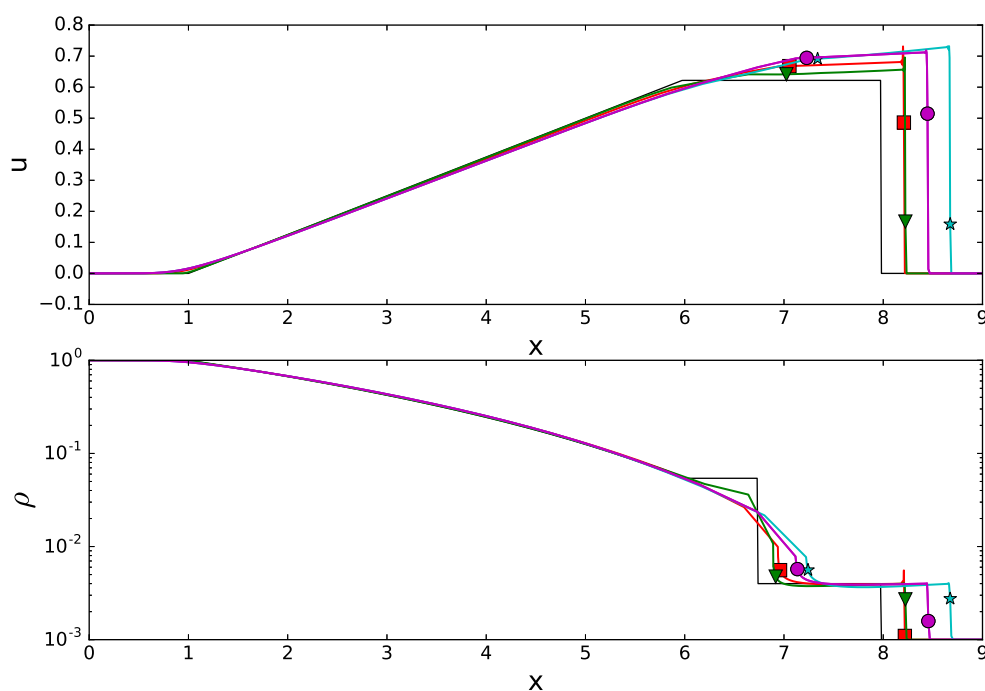


FIGURE 5.7 – Tube à choc de Leblanc. Profils de vitesse (haut) et densité (bas) pour le schéma A et EUCLHYD (●), GLACE (★), le schéma A modifié avec $C_r = 0.5$ (■), le schéma à l'ordre 2 (▼) et solution exacte au temps $t = 6$.

Commençons par remarquer que, sur la figure 5.7, les résultats pour le schéma A et EUCLHYD sont superposés. En effet, l'utilisation de la modification permettant d'obtenir exactement le solveur acoustique dans le cas unidimensionnel, les deux schémas sont identiques ici. Précisons que, sans cette modification, notre schéma donne des résultats similaires à GLACE. De plus, le schéma A modifié et le schéma d'ordre 2 donnent des résultats semblables sur ce maillage. Cependant, le schéma modifié présente un *overshoot* au niveau du choc.

5.1. TESTS UNIDIMENSIONNELS

Comparons maintenant le schéma A modifié avec l'extension à l'ordre 2. À cet effet, on va regarder la convergence de ces deux schémas vers la solution exacte en utilisant quatre maillages différents, $M_1 = 1200 \times 3$, $M_2 = 2400 \times 3$, $M_3 = 4800 \times 3$ et $M_4 = 9600 \times 3$.

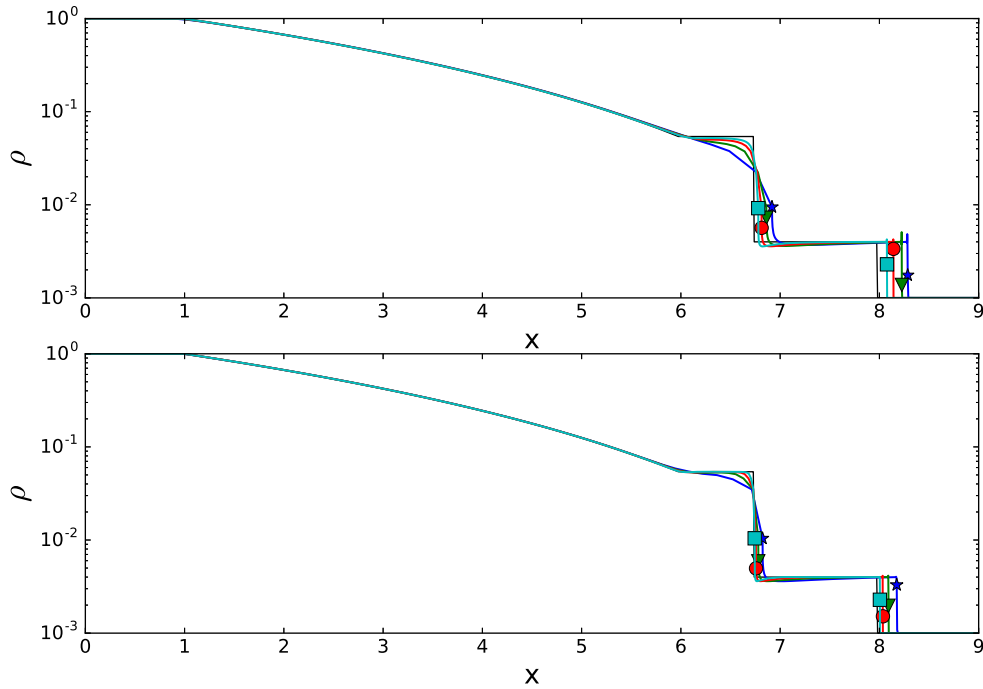


FIGURE 5.8 – Tube à choc de Leblanc. Profil de densité pour le schéma A modifié (haut) et l'extension à l'ordre 2 (bas) sur les maillages M_1 (★), M_2 (▼), M_3 (●), M_4 (■) et solution exacte au temps $t = 6$.

On remarque sur la figure 5.8, que l'extension à l'ordre 2 converge plus rapidement vers la solution exacte et ne présente pas d'*overshoot* au niveau du choc contrairement au schéma A modifié. Cependant, il est important de noter que le schéma A modifié nécessite beaucoup moins de temps de calcul car une simple méthode d'Euler à un pas y est utilisée pour discrétiser l'opérateur temporel, contrairement au schéma d'ordre 2. De plus, l'*overshoot* du schéma A modifié diminue, jusqu'à presque disparaître, quand on raffine le maillage.

Comparons maintenant le schéma original avec le schéma A. Pour cette comparaison nous refaisons exactement ce qui a été fait ci-dessus (voir figure 5.9).

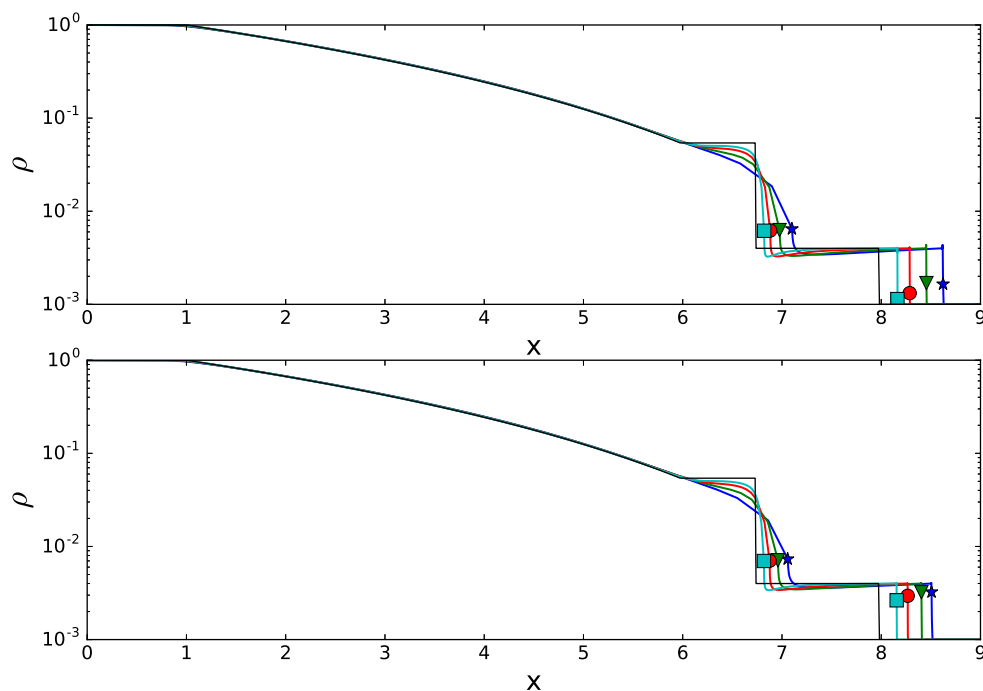


FIGURE 5.9 – Tube à choc de Leblanc. Profil de densité pour notre schéma (haut) et le schéma A (bas) sur les maillages M_1 (★), M_2 (▼), M_3 (●), M_4 (■) et solution exacte au temps $t = 6$.

On peut voir que la position du choc est légèrement différente pour le maillage le moins raffiné. Cependant, la position est presque identique pour le maillage le plus raffiné. Cette modification pourrait être utile dans le cas de chocs forts, mais l'écart de résultat avec le schéma original semble être largement diminué lorsque le maillage est raffiné. Nous n'utiliserons donc plus cette modification dans la suite.

5.1.3 Piston uniformément accéléré

Considérons maintenant le cas d'un piston uniformément accéléré présenté par Landau et Lifshitz [2013]. Ce cas représente la compression d'un gaz parfait grâce à un piston. La vitesse du piston est donnée par $u_{piston}(t) = \kappa t$ où $\kappa > 0$. On suppose le gaz parfait initialement au repos. Il est possible de montrer [Landau et Lifshitz 2013] que ce problème admet une solution continue jusqu'à un temps critique t_c . En notant c_0 , la vitesse du son

TABLE 5.4 – Piston uniformément accéléré. Convergence de la vitesse.

| Maillage | Schéma | Erreur L^1 | Erreur L^∞ | Schéma | Erreur L^1 | Erreur L^∞ |
|-------------------|-----------|----------------|-------------------|---------|----------------|-------------------|
| M_1 | Classique | 8.95E-4 | 1.00E-2 | Modifié | 3.03E-4 | 5.98E-3 |
| M_2 | Classique | 4.62E-4 | 7.25E-3 | Modifié | 1.54E-4 | 4.30E-3 |
| M_3 | Classique | 3.13E-4 | 5.96E-3 | Modifié | 1.03E-4 | 3.54E-3 |
| M_4 | Classique | 2.37E-4 | 5.19E-3 | Modifié | 7.79E-5 | 3.08E-3 |
| Convergence order | | ≈ 0.96 | ≈ 0.48 | | ≈ 0.98 | ≈ 0.48 |

initiale du fluide, on peut montrer que $t_c = \frac{2}{\gamma+1} \frac{c_0}{\kappa}$. De plus, on peut donner une expression analytique de la vitesse pour tout $t < t_c$ et pour tout $x \in [\frac{1}{2}\kappa t^2, c_0 t]$

$$u(t, x) = \kappa h(t, x),$$

$$h(t, x) = -\frac{\gamma+1}{2\gamma}(t_c - t) + \sqrt{\left(\frac{\gamma+1}{2\gamma}\right)^2 (t_c - t)^2 - \frac{\gamma}{2} \left(\frac{x - c_0 t}{\kappa}\right)}.$$

Cette vitesse est nulle si $x > c_0 t$. En pratique, on utilise les données initiales proposées par Maire [2009], qui sont

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{7}{5}, \\ \kappa &= \frac{1}{2}, \\ \rho(t=0, x) &= 1, \\ p(t=0, x) &= 1, \\ u(t=0, x) &= 0. \end{aligned}$$

Le calcul est fait sur un domaine initialement de taille $[0, 2] \times [0, 0.1]$. On fait une étude de convergence sur la vitesse au temps $t = 1.5$, grâce à quatre maillages : $M_1 = 5000 \times 3$, $M_2 = 10000 \times 3$, $M_3 = 15000 \times 3$ et $M_4 = 20000 \times 3$. Les erreurs sont reportées dans le tableau 5.4. On peut remarquer que les résultats précédents se confirment ici : les vitesses de convergences sont similaires mais les erreurs commises avec le schéma modifié sont plus faibles. On observe aussi que ce comportement se confirme sur l'erreur L^∞ .

5.2 Tests multidimensionnels

5.2.1 Cas test de Saltzmann

Intéressons nous au cas test de Saltzmann présenté, par exemple, par Dukowicz et Meltz [1992]. Ce cas permet d'observer la robustesse du schéma face à la déformation du maillage. Ce test est, ici aussi, un problème de tube à choc unidimensionnel. Cependant, il est résolu en utilisant un maillage initialement déformé. Le principe est de regarder la compression,

par un piston, d'un gaz parfait initialement au repos.

5.2.1.1 Cas test original

Dans cette première version, nous regardons le cas classique. Le gaz parfait est de constante adiabatique $\gamma = \frac{5}{3}$ et initialement au repos

$$(\rho, \mathbf{u}, E)(t = 0) = (1, \mathbf{0}, 10^{-4}).$$

Le domaine de calcul est une boîte de taille $[0, 1] \times [0, 0.1]$ où la paroi de gauche agit comme un piston de vitesse imposée $\mathbf{u}_{piston} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ alors que les autres parois sont des murs glissants.

Le maillage est structuré, de dimension 100×10 et défini par les noeuds initialement positionnés de la manière suivante

$$\begin{cases} x_{i,j} = idx + (10 - j) dy \sin\left(\frac{i\pi}{100}\right), \\ y_{i,j} = jdy, \end{cases}$$

où $\mathbf{x}_{i,j} = \begin{pmatrix} x_{i,j} \\ y_{i,j} \end{pmatrix}$, $i = 0, 1, \dots, 100$, $j = 0, 1, \dots, 10$, $dx = \frac{1}{100}$ et $dy = \frac{1}{10}$. Le maillage initial est représenté sur la figure 5.10.

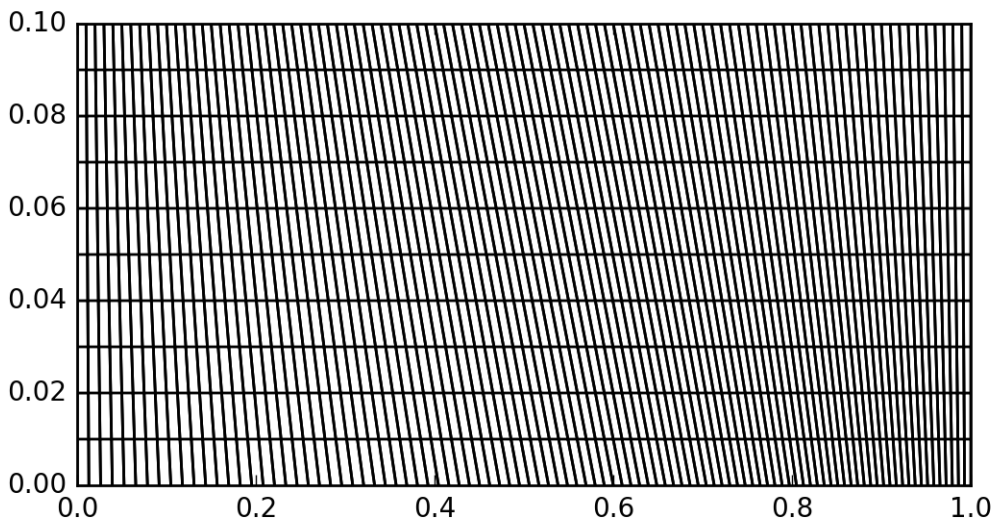


FIGURE 5.10 – Test de Saltzmann. Maillage initial.

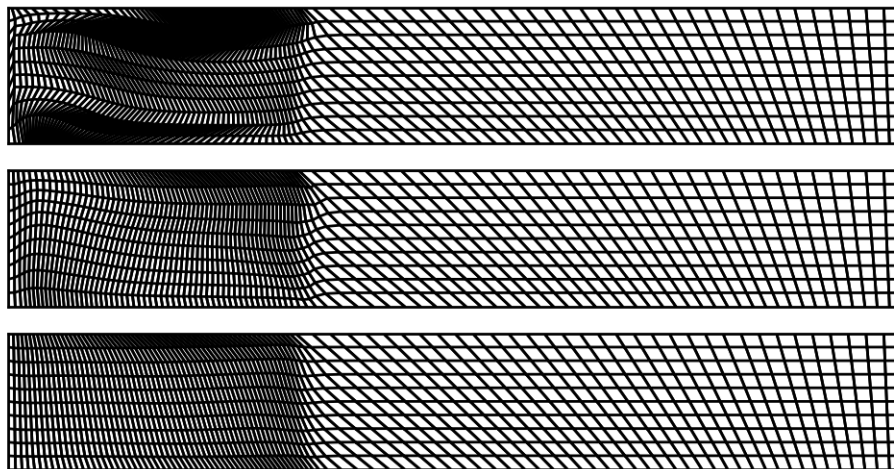


FIGURE 5.11 – Test de Saltzmann. Maillage pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 0.5$.

Dans un premier temps, nous observons la déformation du maillage au temps $t = 0.5$ sur la figure 5.11. On remarque que notre schéma donne le maillage le plus dégradé. En effet, avec notre schéma, il est impossible d’aller plus loin qu’un temps avoisinant les $t = 0.65$. Par contre, avec les schémas GLACE et EUCCLHYD, on peut mener les calculs jusqu’à des temps supérieurs à $t = 0.9$. L’observation des vitesses et des pressions sur la figure 5.12 confirme les moins bons résultats de notre schéma sur ce cas.

Au-delà du fait que notre schéma fonctionne très mal ici, il est intéressant d’essayer d’en comprendre les raisons. Une première question se pose : est-ce dû au fait de ne pas être entropique, comme le sont EUCCLHYD et GLACE, qu’on obtient ce problème ? On rappelle que, pour un gaz parfait, l’entropie s est définie par

$$s = c_v \ln \left(\frac{p}{\rho^\gamma} \right) - c_v \ln(\gamma - 1) + s_0,$$

où c_v et s_0 sont des constantes liées au gaz considéré. On définit alors la quantité

$$\sigma = \ln \left(\frac{p}{\rho^\gamma} \right).$$

On trace $\frac{\Delta\sigma_j}{\Delta t} = \frac{\sigma_j^{n+1} - \sigma_j^n}{t^{n+1} - t^n}$ en fonction du temps sur la figure 5.13. On a ici choisi une cellule j correspondant à une cellule très déformée au temps final avec notre schéma. Rappelons

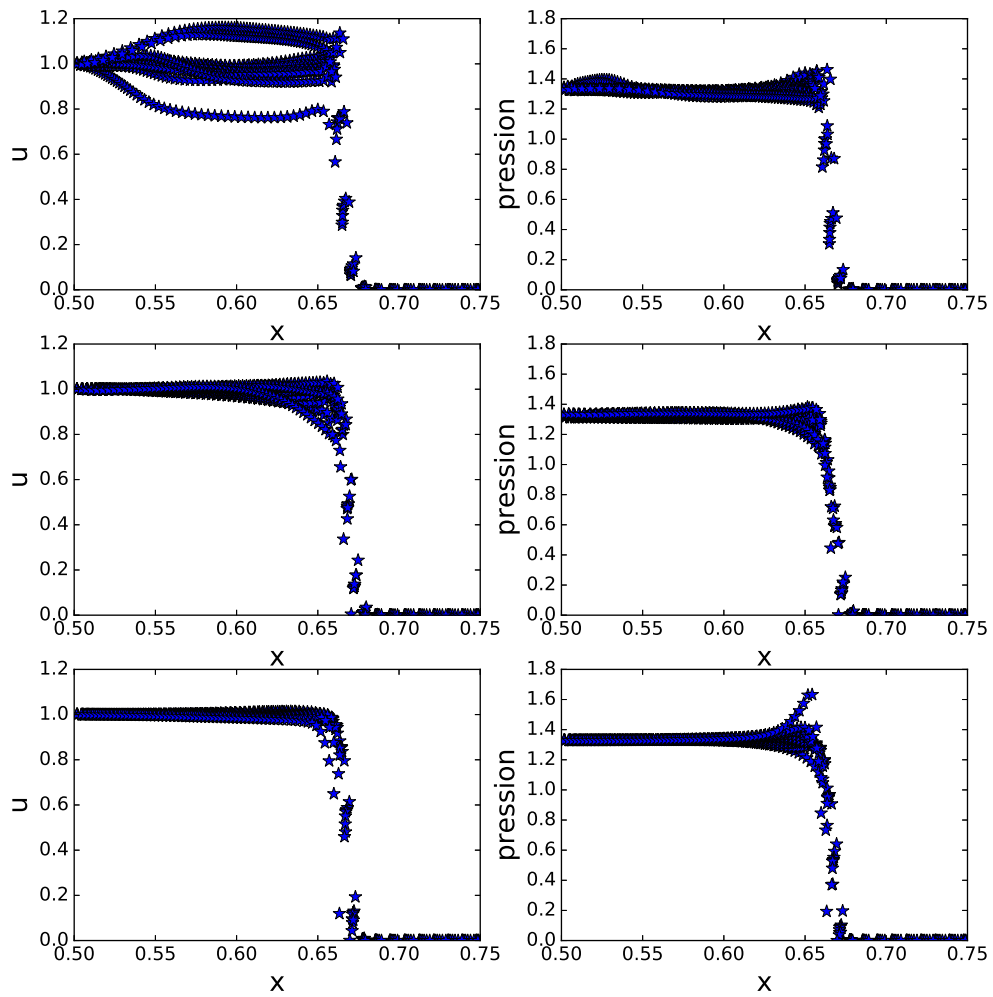


FIGURE 5.12 – Test de Saltzmann. Profils de vitesse (gauche) et pression (droite) pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 0.5$.

qu'en théorie, l'entropie ne peut que croître, et que donc la quantité $\frac{\Delta\sigma_j}{\Delta t}$ devrait tout le temps être positive.

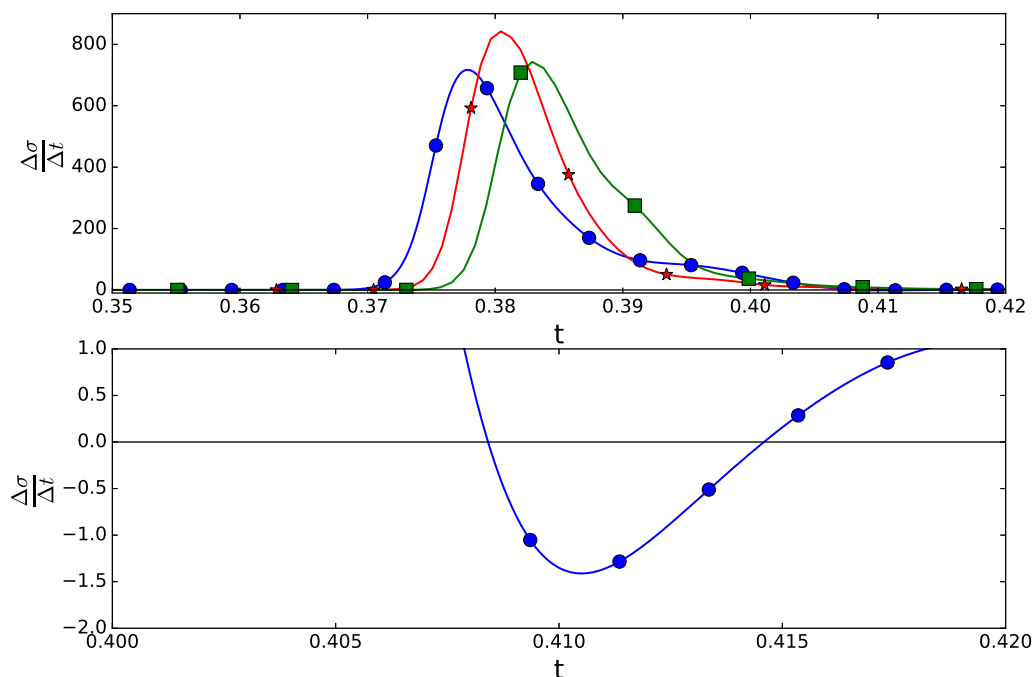


FIGURE 5.13 – Test de Saltzmann. Variation d'entropie pour notre schéma (●), GLACE (★) et EUCCLHYD (■) en fonction du temps. La partie basse de la figure est un zoom sur la partie haute.

Cette figure nous montre que les variations d'entropie sont globalement assez similaires. L'entropie est bien croissante quand le choc atteint la cellule. Cependant, nous observons qu'à la fin du passage du choc dans la cellule, l'entropie donnée par notre schéma décroît légèrement. Nous examinerons de manière plus approfondie ce problème à la partie 5.2.3 grâce à l'utilisation des schémas hybrides entropiques présentés à la partie 4.7 du chapitre trois.

Précisons tout de même que le cadre général de ce test ne correspond absolument pas à l'application que nous voulons faire de ce schéma. En effet, notre but est d'observer l'explosion vapeur, ce qui suppose des pressions beaucoup plus élevées en présence d'eau.

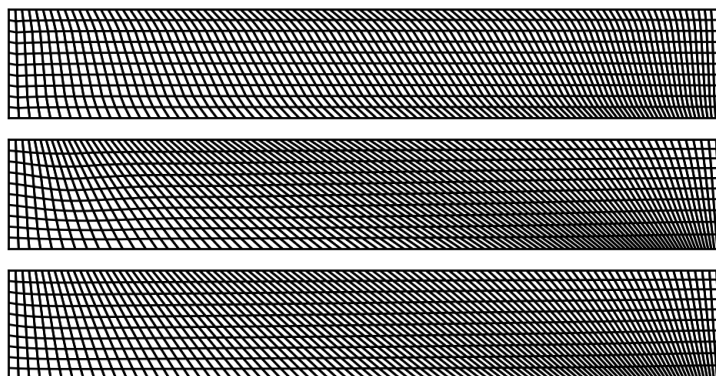


FIGURE 5.14 – Test de Saltzmann modifié. Maillage pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 0.005$ s.

5.2.1.2 Cas test modifié

Suite à la remarque précédente, nous nous intéressons à un cas test de type Saltzmann dans des conditions plus proches de celles qui nous intéressent. Nous reprenons donc le maillage initial du cas test de Saltzmann tout en modifiant les conditions initiales pour nous placer à pression atmosphérique

$$(\rho, \mathbf{u}, p)(t = 0) = (1 \text{ kg/m}^3, \mathbf{0} \text{ m/s}, 10^5 \text{ Pa}).$$

Par ailleurs, la vitesse du piston est maintenant fixée à 100 m/s. Les résultats sont donnés au temps $t = 5.10^{-3}$ s. On peut voir sur la figure 5.14 que les maillages au temps final sont très peu déformés. On peut malgré tout remarquer que c'est notre schéma qui présente le maillage ayant le moins de déformations. Sur la figure 5.15, on représente la pression et la vitesse en fonction de la distance au piston. Remarquons d'abord que le choc a déjà rebondi à plusieurs reprises sur les bords du domaine. Il est donc normal que la pression finale soit plus importante que la pression initiale et que nous n'ayons pas de résultat analytique pour comparaison. Sur ce cas, c'est notre schéma qui donne les meilleurs résultats. En effet, nous avons ici parfaitement conservé la symétrie unidimensionnelle du cas test. De plus le choc est mieux conservé : il s'est moins dissipé. Le caractère moins dissipatif de notre schéma peut d'ailleurs aussi expliquer les mauvais résultats obtenus sur le cas test de Saltzmann original.

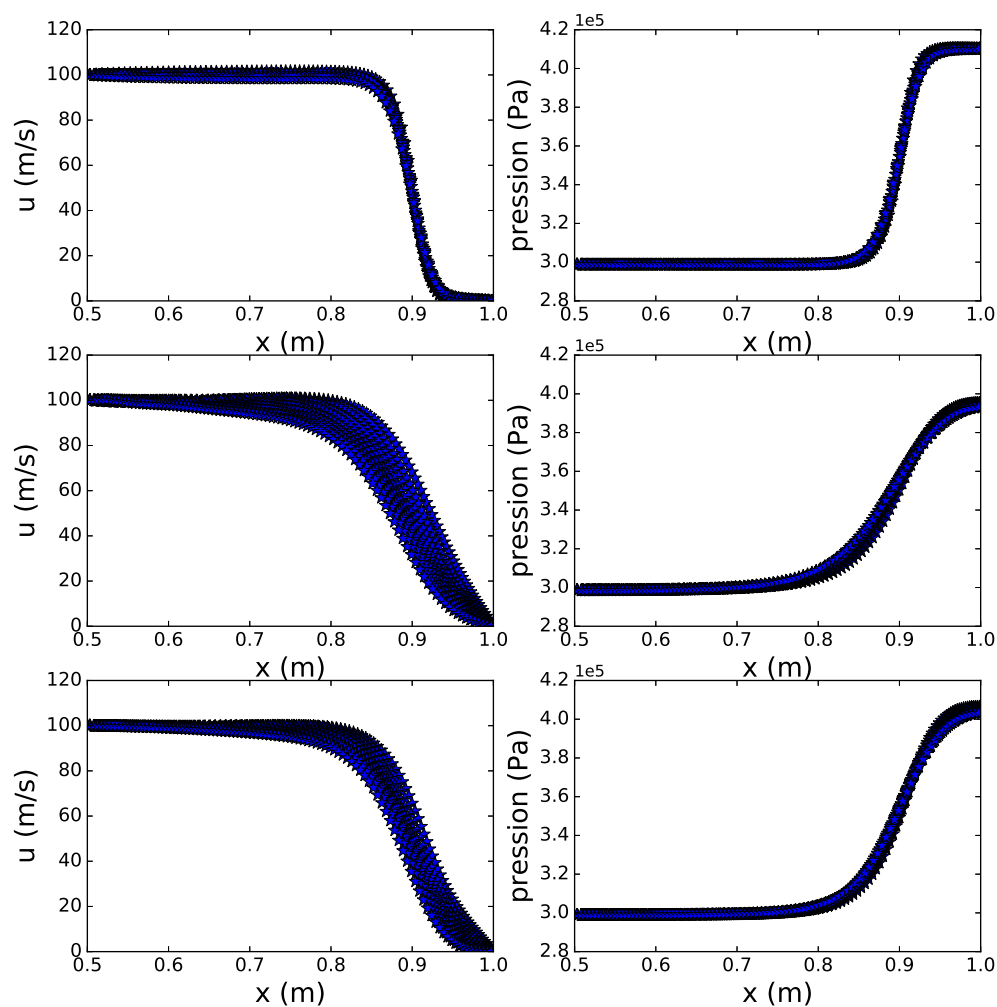


FIGURE 5.15 – Test de Saltzman modifié. Profils de vitesse (gauche) et pression (droite) pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 0.005$ s.

5.2.2 Cas test de Sedov

Nous nous intéressons maintenant à un cas test classique pour l'hydrodynamique Lagrangienne, le test de Sedov [Kamm et Timmes 2007; Maire 2009]. Avant de présenter ce cas, précisons qu'il se place dans des conditions proches de celles du cas de Saltzman, et donc éloignées des conditions dans lesquelles nous voulons appliquer notre schéma. Nous le présentons cependant pour être exhaustif.

5.2. TESTS MULTIDIMENSIONNELS

Ce cas est une onde de choc cylindrique calculée sur un maillage cartésien. Le maillage étant structuré, nous noterons $\Omega_{i,j}$ les cellules. Ce cas consiste à prendre un fluide au repos, puis à concentrer une large quantité d'énergie dans quelques cellules.

Le domaine considéré est de dimension $[0, 1.2] \times [0, 1.2]$, rempli par un gaz parfait de constante adiabatique $\gamma = \frac{7}{5}$. Le fluide au repos est caractérisé par

$$(\rho, \mathbf{u}, P)(t = 0) = (1, \mathbf{0}, 10^{-6}).$$

On suppose que l'énergie initiale à l'origine est

$$e_{or} = \frac{\epsilon_{or}}{V_{or}},$$

où on fixe, comme suggéré par Kamm et Timmes [2007], $\epsilon_{or} = 0.244816$ et V_{or} est le volume de la cellule contenant l'origine. Nous définissons alors l'énergie dans les cellules proches de l'origine par

$$\begin{aligned} e_{1,1} &= \frac{4}{9}e_{or}, \\ e_{1,2} &= e_{2,1} = \frac{2}{9}e_{or}, \\ e_{2,2} &= \frac{1}{9}e_{or}. \end{aligned}$$

Les vitesses et densités de ces cellules proches de l'origine sont elles aussi fixées à 1 et $\mathbf{0}$.

La solution de ce problème est une onde de choc cylindrique qui doit être située à un rayon de 1 au temps $t = 1$ et dont le pic de densité doit être de 6. Pour ce test, on utilise un maillage 70×70 . Les maillages au temps final sont tracés sur la figure 5.16. On remarque que le maillage donné par EUCCLHYD est moins déformé et permettra de poursuivre les calculs plus longtemps. On trace de plus sur la figure 5.17 les densités au temps final. Ici aussi, on remarque qu'EUCCLHYD donne de meilleurs résultats. La symétrie du problème est mieux préservée, et notre schéma dépasse largement la valeur maximale de la densité censée être de 6. De même que pour le cas test de Saltzmann, on trace aussi l'évolution de $\frac{\Delta\sigma_j}{\Delta t}$ en fonction du temps sur la figure 5.18. On remarque que les résultats sont très similaires à ceux obtenus avec le cas de Saltzmann : l'entropie croît correctement lorsque le choc atteint la cellule puis décroît légèrement à la fin.

5.2.3 Application d'un θ -schéma

Dans cette partie, nous cherchons à comprendre les mauvais résultats obtenus sur les cas tests de Saltzmann et Sedov. En particulier, nous cherchons à déterminer si le défaut

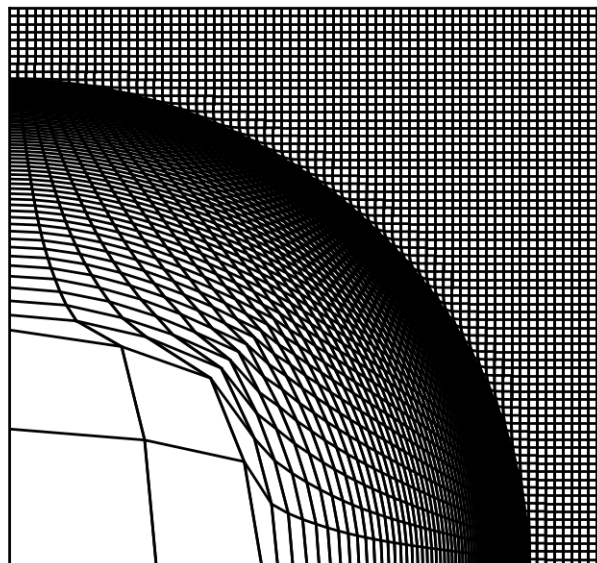
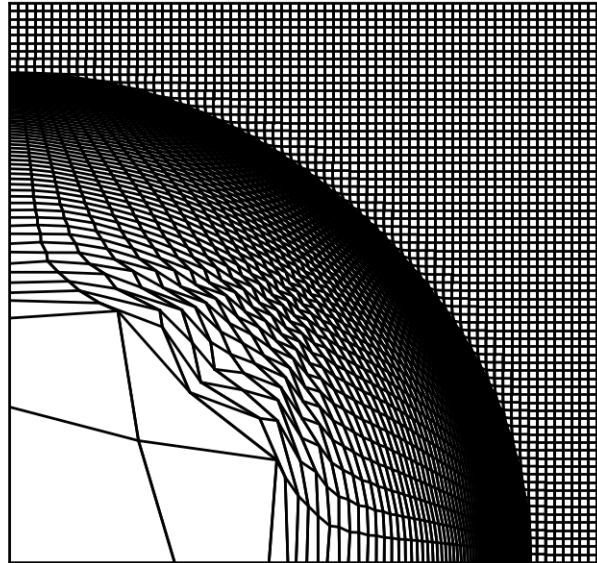


FIGURE 5.16 – Test de Sedov. Maillage pour notre schéma (haut) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 1$.

5.2. TESTS MULTIDIMENSIONNELS

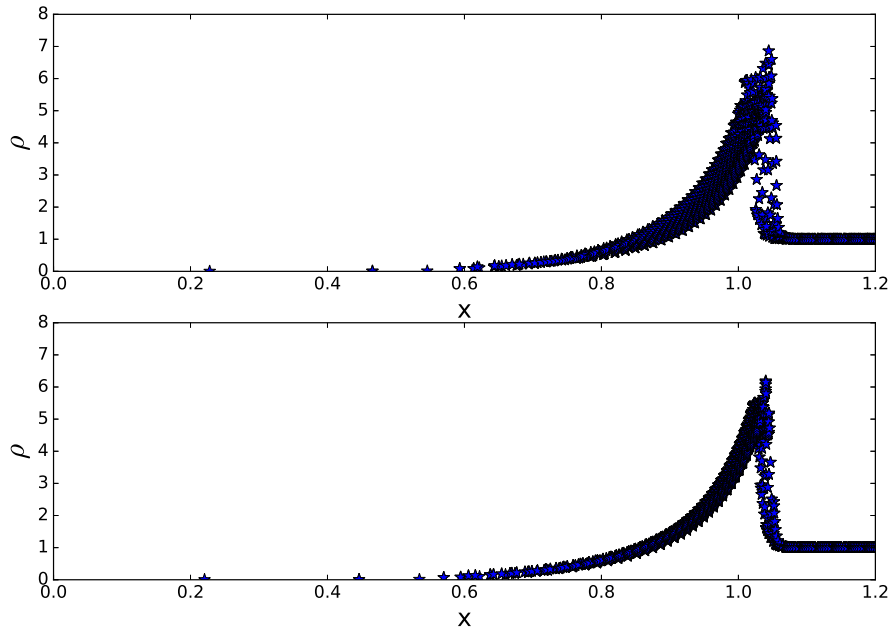


FIGURE 5.17 – Test de Sedov. Profil de densité pour notre schéma (haut) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 1$.

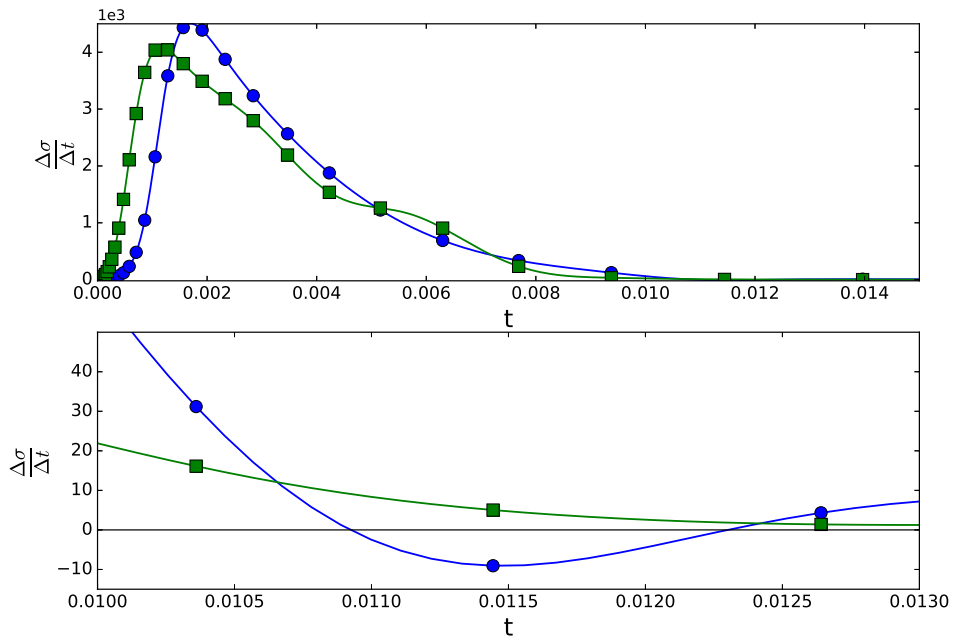


FIGURE 5.18 – Test de Sedov. Variation d'entropie pour notre schéma (●) et EUCCLHYD (■) en fonction du temps. La partie basse de la figure est un zoom sur la partie haute.

d'entropie ou la faible dissipation de notre schéma peuvent être responsables de ces résultats. Pour étudier ce problème, nous allons utiliser les θ -schémas décrits à la partie 4.7. Nous appelons θ -schéma classique le schéma où $\theta = 0.95$ est fixé et θ -schéma entropique, le cas où θ est choisi de manière à ce que le schéma soit entropique. Le θ -schéma entropique local correspond au cas où on définit des θ_r localement au niveau de chaque noeud.

5.2.3.1 Cas test de Saltzmann original

On regarde ici le cas test de Saltzmann classique décrit à la partie 5.2.1.1. On trace sur la figure 5.19 les maillages au temps $t=0.9$, les vitesses et pressions au temps $t=0.5$ sur la figure 5.20 et les variations d'entropies $\frac{\Delta\sigma_j}{\Delta t}$ sur la figure 5.21.

Avant d'essayer d'interpréter les résultats obtenus, rappelons que les schémas hybrides entropiques ont été construits de manière à ce que $\frac{d}{dt}s_j \geq 0$ pour toute cellule j . Cependant, cette condition n'assure pas que $s_j^{n+1} \geq s_j^n$ pour toute cellule. On peut d'ailleurs voir numériquement (figure 5.21), qu'il apparaît que seul le schéma hybride entropique local semble vérifier cette dernière propriété.

Il apparaît d'ailleurs aussi clairement que le fait de vérifier cette inégalité entropique n'implique pas que le maillage final soit moins déformé. En regardant ces résultats, on ne peut pas affirmer que le non respect de l'inégalité entropique par notre schéma original soit (seul) responsable des mauvais résultats obtenus. On observe d'ailleurs que le schéma hybride entropique donne un maillage très proche de celui obtenu avec EUCCLHYD, tout en ayant un défaut d'entropie similaire à celui obtenu avec notre schéma.

De plus, nous avons essayé d'utiliser un schéma hybride en utilisant le schéma GLACE (lui aussi entropique). Nous avons alors constaté que, même si les résultats sont améliorés, les calculs ne peuvent pas être menés au-delà d'un temps $t = 0.81$.

5.2.3.2 Cas test de Saltzmann modifié

Nous regardons ici le comportement des schémas hybrides sur le cas test de Saltzmann modifié présenté à la partie 5.2.1.2. On trace sur la figure 5.22 la pression et la vitesse. Les résultats obtenus pour les trois schémas hybrides sont très proches de la solution numérique obtenue avec EUCCLHYD (voir partie 5.2.1.2). Cela renforce notre idée qu'une

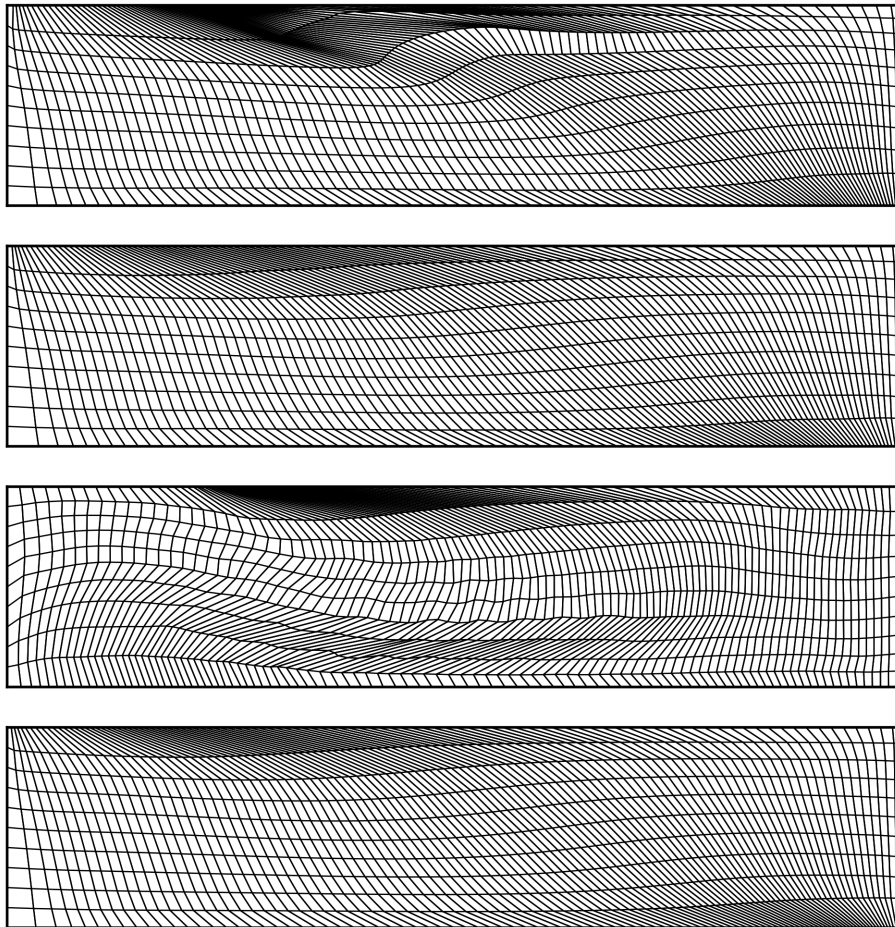


FIGURE 5.19 – Test de Saltzmann. Maillages pour (de haut en bas) $\theta = 0.95$, le schéma entropique global, entropique local et EUCCLHYD au temps $t = 0.9$.

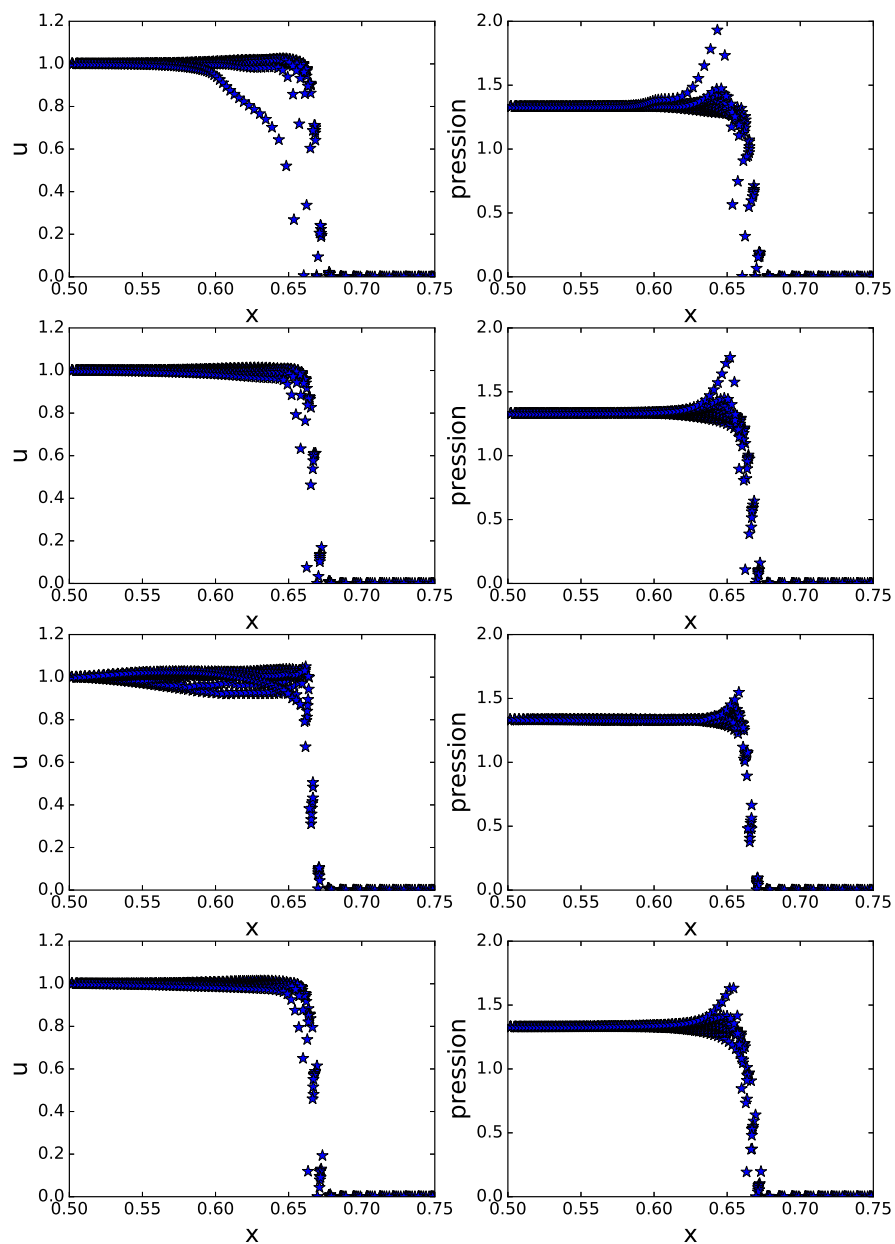


FIGURE 5.20 – Test de Saltzman. Profils de vitesse (gauche) et pression (droite) pour (de haut en bas) $\theta = 0.95$, le schéma entropique global, entropique local et EUCCLHYD au temps $t = 0.5$.

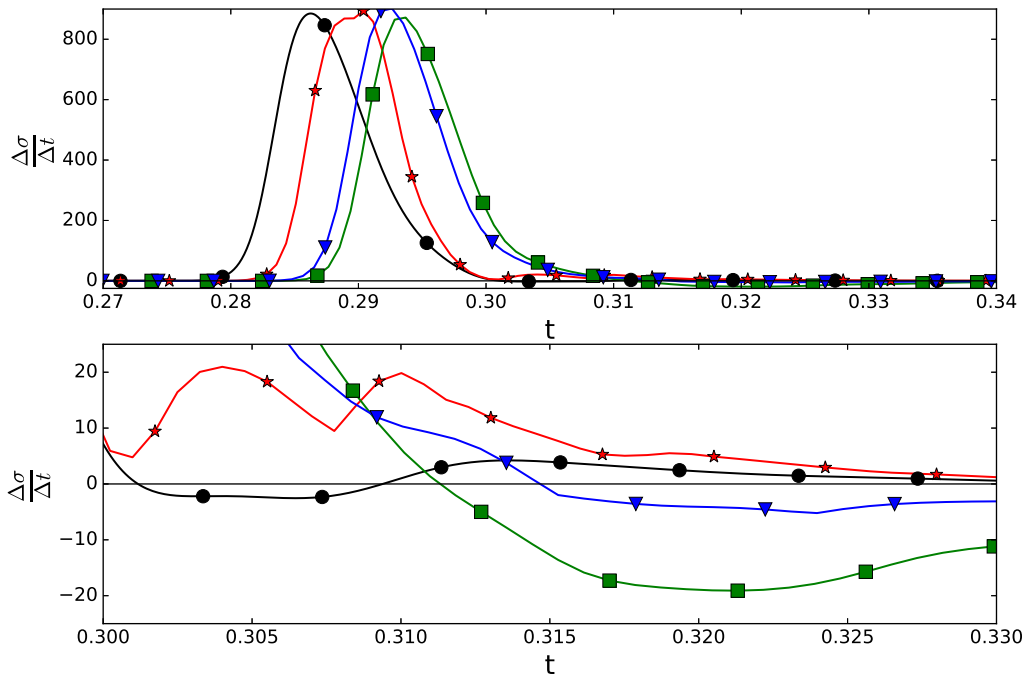


FIGURE 5.21 – Test de Saltzmann. $\frac{\Delta\sigma_j}{\Delta t}$ pour $\theta = 0.95$ (■), le schéma entropique local (★), entropique global (▼) et le schéma classique sans modifications (●) en fonction du temps. La partie basse de la figure est un zoom sur la partie haute.

telle hybridation introduit beaucoup de dissipation, ce qui favorise les calculs sur le cas test de Saltzmann. Cela implique par la même occasion, la perte des bons résultats obtenus par notre schéma sur ce cas.

De notre point de vue, ces résultats montrent que c'est la faible dissipation du schéma numérique qui entraîne les mauvais résultats obtenus sur le cas test de Saltzmann et non le non respect de l'inégalité entropique. Cela est d'ailleurs en adéquation avec les moins bons résultats obtenus sur ces cas lors de l'hybridation avec GLACE. En effet, il est connu que GLACE est moins dissipatif qu'EUCCLHYD. Il est donc probable que l'hybridation avec GLACE n'apporte pas suffisamment de dissipation au schéma pour obtenir de bons résultats.

5.2.3.3 Cas test de Sedov

Nous voulons maintenant, regarder le comportement des schémas hybrides sur le cas test de Sedov présenté à la partie 5.2.2. Les calculs sont faits sur un maillage cartésien 50×50 . Nous observons la variation de l'entropie au cours du temps dans une cellule (figure 5.23), les maillages au temps final (figure 5.24) et la densité (figure 5.25).

Nous remarquons sur la figure 5.25 que les différentes méthodes d'hybridations améliorent les résultats. Le pic de densité trop élevé, donné par notre schéma, est nettement amélioré avec ceux-ci. Cependant, la figure 5.24 montre que les schémas obtenus avec les méthodes hybrides posent problème. En effet, les troisième et quatrième noeuds situés sur l'axe des abscisses sont très proches, et cela pourrait conduire à des retournements de mailles par la suite ou des chutes du pas de temps.

5.2.4 Compression isentropique

On s'intéresse maintenant au cas test de Kidder [1976] qui est une compression isentropique. Il est possible pour ce cas, de calculer une solution analytique permettant la comparaison des résultats numériques aux résultats analytiques.

Le cas test est le suivant, on considère une couronne initialement de rayon intérieur R_i et de rayon extérieur R_e . On note p_i, ρ_i (resp p_e, ρ_e) la pression et la densité sur le rayon intérieur (resp extérieur) de la couronne. Cette couronne est remplie par un gaz parfait.

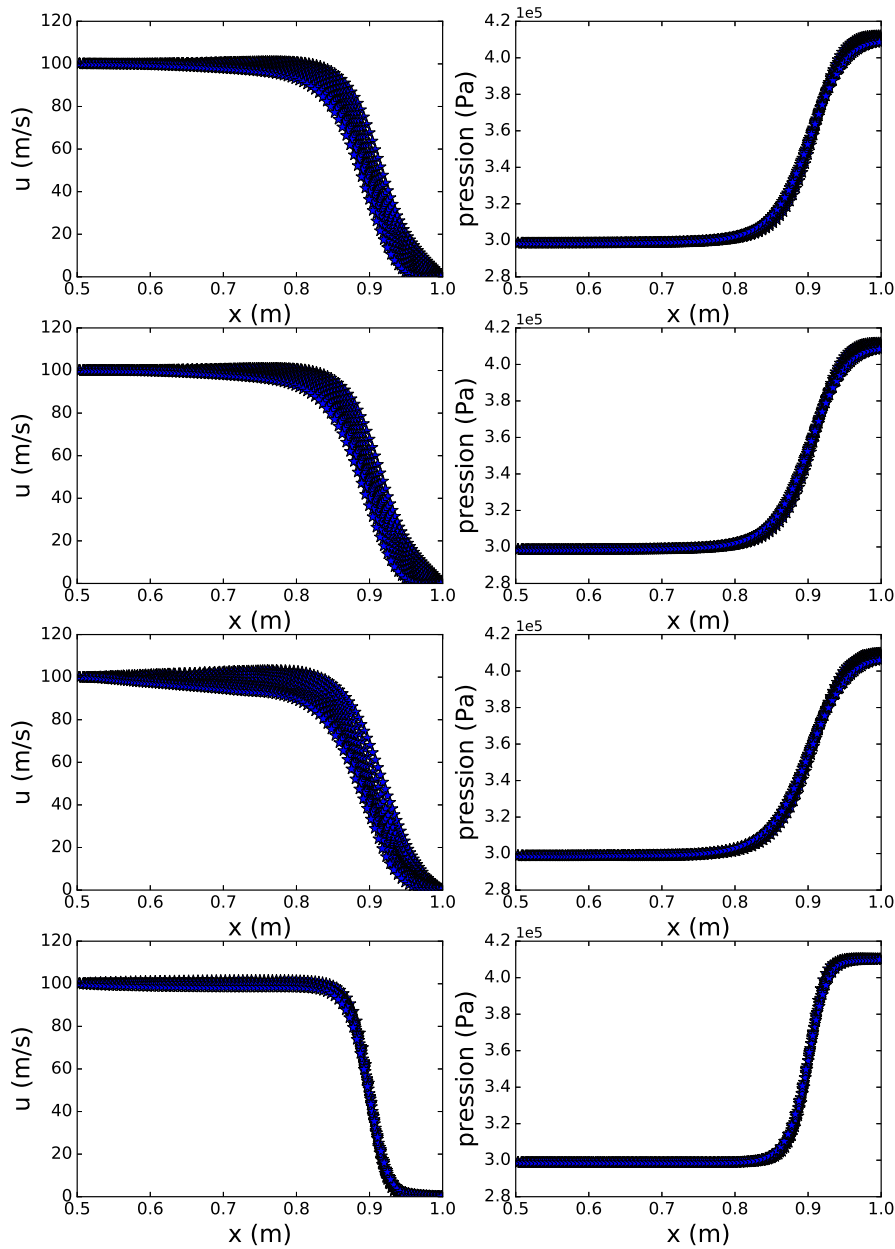


FIGURE 5.22 – Test de Saltzman modifié. Profils de vitesse (gauche) et pression (droite) pour (de haut en bas) $\theta = 0.95$, le schéma entropique global, entropique local et notre schéma non modifié au temps $t = 0.5$.

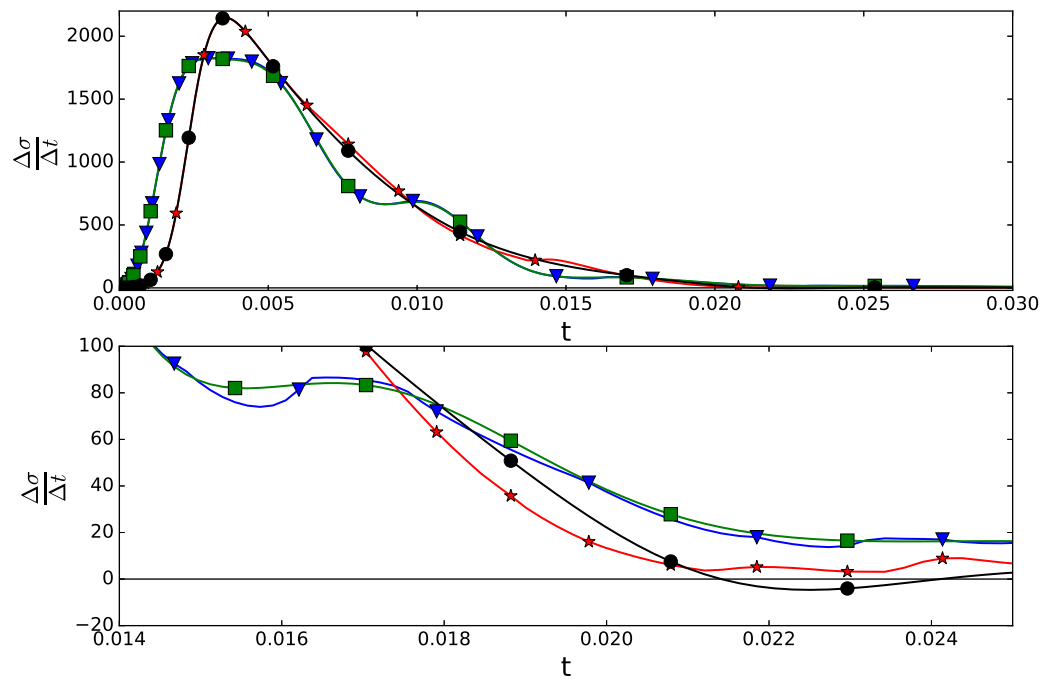


FIGURE 5.23 – Test de Sedov. $\frac{\Delta\sigma_j}{\Delta t}$ pour $\theta = 0.95$ (■), le schéma entropique local (★), entropique global (▼) et le schéma classique sans modifications (●) au fonction du temps. La partie basse de la figure est un zoom sur la partie haute.

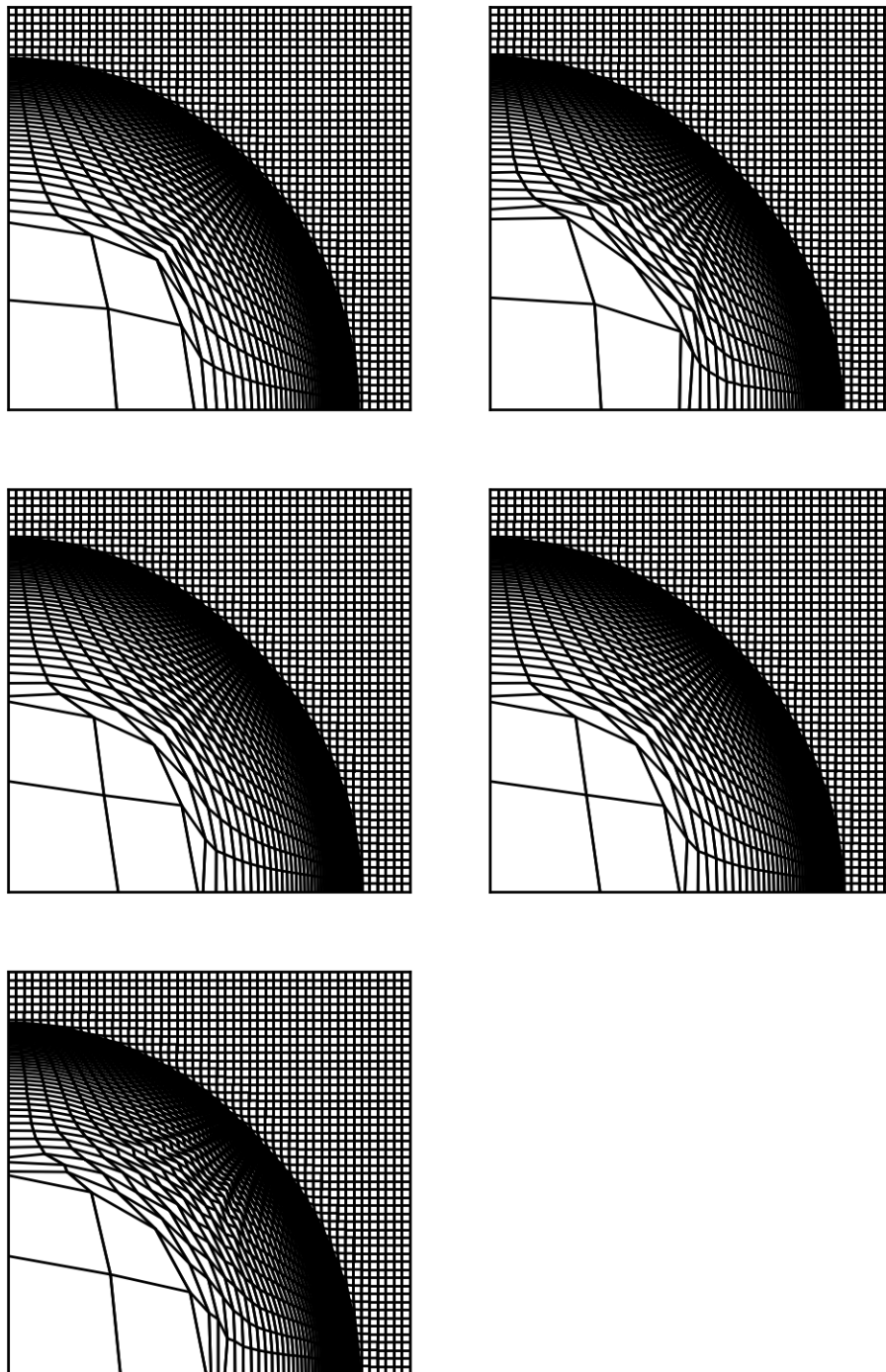


FIGURE 5.24 – Test de Sedov. Maillage pour (dans le sens de lecture) EUCCLHYD, notre schéma non modifié, $\theta = 0.95$, le schéma entropique global et entropique local au temps $t = 1$.

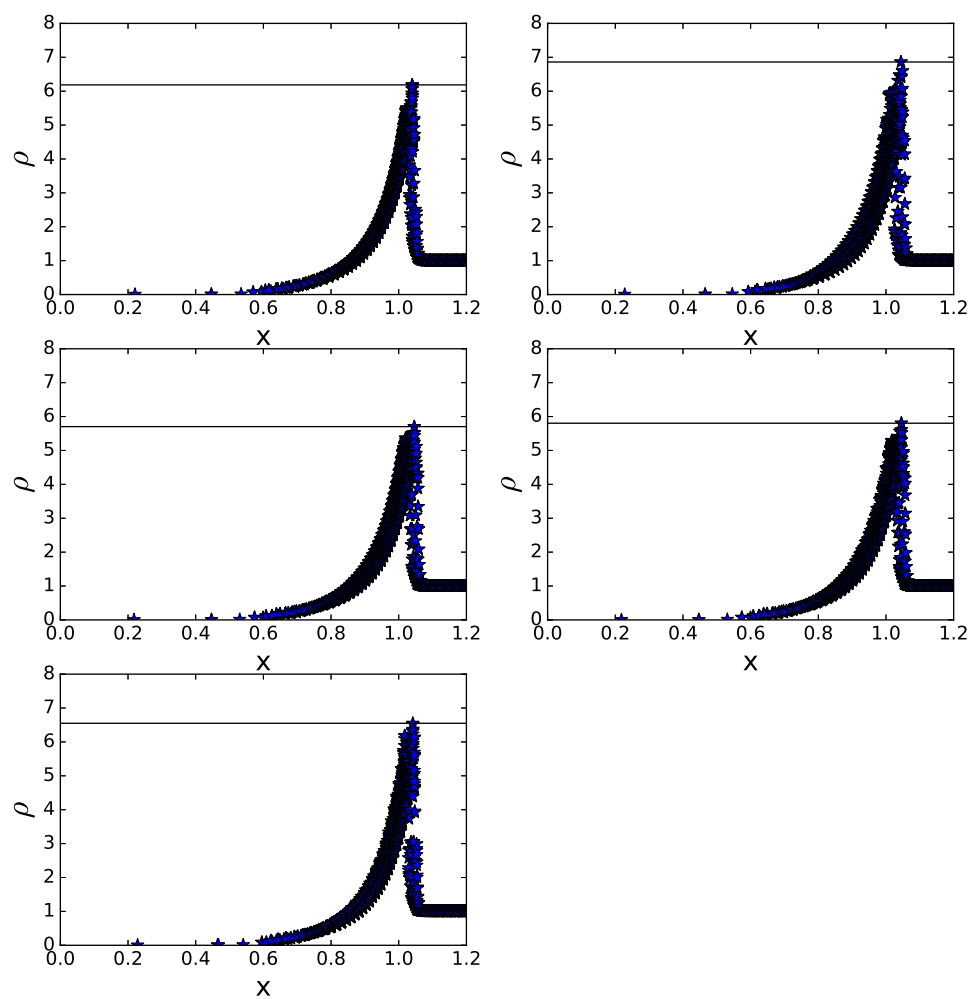


FIGURE 5.25 – Test de Sedov. Profils de densité pour (dans le sens de lecture) EUCCLHYD, notre schéma non modifié, $\theta = 0.95$, le schéma entropique global et entropique local au temps $t = 1$.

Souhaitant regarder une compression isentropique, on doit avoir $\rho_i = \rho_e \left(\frac{p_i}{p_e} \right)^{\frac{1}{\gamma}}$. Notons $r(R, t)$ la distance à l'origine d'une particule à l'instant t étant initialement à distance R de l'origine. En fixant la constante adiabatique du gaz parfait $\gamma = 2$, la solution analytique peut s'écrire, pour tout $t \in [0, t_c[$

$$\begin{aligned} r(R, t) &= h(t) R, \\ \rho(r(R, t), t) &= h(t)^{-\frac{2}{\gamma-1}} \rho_0(R), \\ \mathbf{u}(r(R, t), t) &= h'(t) r, \\ p(r(R, t), t) &= h(t)^{-\frac{2\gamma}{\gamma-1}} p_0(R). \end{aligned}$$

où $t_c = \sqrt{\frac{\gamma-1}{2} \frac{r_e^2 - r_i^2}{c_e^2 - c_i^2}}$ correspond au temps où la couronne se rétracte sur elle-même et $h(t) = \sqrt{1 - \left(\frac{t}{t_c} \right)^2}$. Initialement, le fluide est défini par

$$\begin{aligned} \rho(t=0, R) &= \left(\frac{R_e^2 - R^2}{R_e^2 - R_i^2} \rho_i^{\gamma-1} + \frac{R^2 - R_i^2}{R_e^2 - R_i^2} \rho_e^{\gamma-1} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}}, \\ p(t=0, R) &= \sigma \rho_0(R)^\gamma, \\ \mathbf{u}(t=0, R) &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Pour obtenir une compression, on impose les pressions extérieures au niveau des faces intérieure et extérieure de la couronne

$$\begin{aligned} p(r(R_i, t), t) &= p_i h(t)^{-\frac{2\gamma}{\gamma-1}}, \\ p(r(R_e, t), t) &= p_e h(t)^{-\frac{2\gamma}{\gamma-1}}. \end{aligned}$$

Nous prenons ici, comme suggéré par Carré et al. [2009],

$$\begin{aligned} \rho_i &= 1, \\ \rho_e &= 2, \\ \sigma &= 1. \end{aligned}$$

Pour des raisons de symétries, le calcul de ce test n'est effectué que sur le quart supérieur droit du domaine. On reporte dans les tableaux 5.5 et 5.6 les erreurs commises sur les rayons intérieurs et extérieurs pour des maillages polaires $M_1 = 80 \times 80$, $M_2 = 160 \times 160$, $M_3 = 240 \times 240$ et $M_4 = 320 \times 320$ au temps $t = \frac{\sqrt{3}}{2}$. Les trois schémas donnent des résultats très similaires sur ce cas test.

5.2.5 Vortex dans une boîte

Nous considérons maintenant un cas test classique dans le domaine bas-mach. Les problèmes des schémas numériques pour des applications bas mach étant, qu'en général, ils

TABLE 5.5 – Compression isentropique. Convergence du rayon intérieur.

| Maillage | Notre schéma | GLACE | EUCCLHYD |
|------------------------|----------------|----------------|----------------|
| M_1 | 2.78E-3 | 2.02E-3 | 1.63E-3 |
| M_2 | 1.36E-3 | 9.69E-4 | 7.71E-4 |
| M_3 | 9.03E-4 | 6.37E-4 | 5.04E-4 |
| M_4 | 6.75E-4 | 4.74E-4 | 3.75E-4 |
| Vitesse de convergence | ≈ 1.01 | ≈ 1.02 | ≈ 1.03 |

TABLE 5.6 – Compression isentropique. Convergence du rayon extérieur.

| Maillage | Notre schéma | GLACE | EUCCLHYD |
|------------------------|----------------|----------------|----------------|
| M_1 | 6.27E-4 | 1.14E-3 | 4.26E-4 |
| M_2 | 2.82E-4 | 5.27E-4 | 1.70E-4 |
| M_3 | 1.81E-4 | 3.41E-4 | 1.03E-4 |
| M_4 | 1.33E-4 | 2.52E-4 | 7.39E-5 |
| Vitesse de convergence | ≈ 1.07 | ≈ 1.05 | ≈ 1.16 |

dissipent trop et nécessitent donc des corrections (voir [Chalons et al. 2016; Dellacherie et al. 2016]). Or, nous avons pu voir que notre schéma numérique a une faible dissipation. Nous voulons donc observer la dissipation de notre schéma dans un tel domaine d'application.

Le cas test que nous considérons est un simple cas de vortex dans une boîte présenté par Colella et Pao [1999] et aussi étudié par Chalons et al. [2016]. Le domaine considéré est de dimension $[0, 1] \times [0, 1]$ et est initialement rempli par un gaz parfait d'indice adiabatique $\gamma = 1.4$. Son état initial est donné par

$$\begin{aligned}\rho(x, y) &= 1 - \frac{1}{2} \tan\left(y - \frac{1}{2}\right), \\ u(x, y) &= 2 \sin^2(\pi x) \sin(\pi y) \cos(\pi y), \\ v(x, y) &= -2 \sin(\pi x) \cos(\pi x) \sin^2(\pi y), \\ p &= 1000,\end{aligned}$$

où on a utilisé les notations classiques $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ et $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$. Le domaine est discrétisé par un maillage cartésien de taille 50×50 . Nous nous intéressons ici à la potentielle dissipation de la vitesse, censée rester constante. On trace donc sur la figure 5.26 l'amplitude de la vitesse au temps $t = 0.125$. On peut remarquer sur cette figure, que contrairement aux schémas EUCCLHYD et GLACE, notre schéma ne souffre pas de dissipation et donne des résultats similaires à ceux obtenus par Chalons et al. [2016] avec un schéma numérique

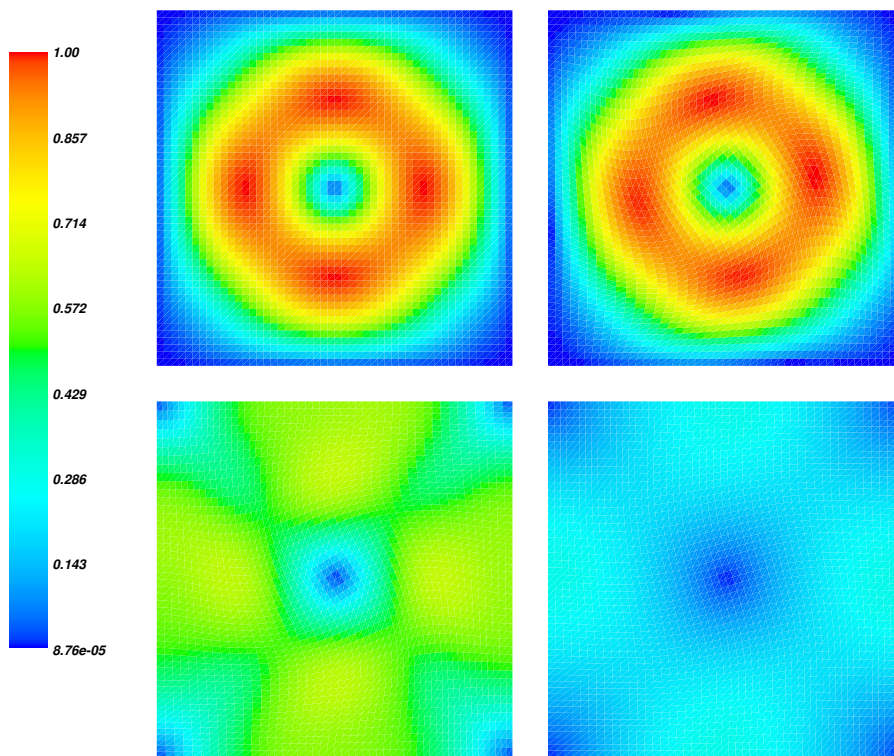


FIGURE 5.26 – Vortex. Amplitude de la vitesse à l'état initial (haut gauche) et au temps $t = 0.125$ pour notre schéma (haut droite), GLACE (bas gauche) et EUCCLHYD (bas droite).

utilisant une correction bas mach. Ce résultat montre encore la très faible dissipation de notre schéma.

5.2.6 Instabilité de Richtmyer-Meshkov

Rappelons que l'utilisation de la description Lagrangienne a été faite dans le but de conserver exactement les interfaces entre différents matériaux. Le but de ce cas test est de regarder le comportement d'une interface initialement perturbée et s'il est en adéquation avec la théorie.

On s'intéresse ici plus particulièrement à l'instabilité décrite par Richtmyer [1960]. Cette instabilité apparaît lorsqu'un choc interagit avec une interface entre deux fluides initialement perturbée. La théorie linéaire [Yang et al. 1994] nous dit que l'évolution de l'amplitude de l'interface doit alors, pour des perturbations initialement petites, être

linéaire en temps. Pour étudier ce phénomène, nous reprenons le cas test proposé par Maire [2009]. La configuration initiale du cas test est décrite sur la figure 5.27.

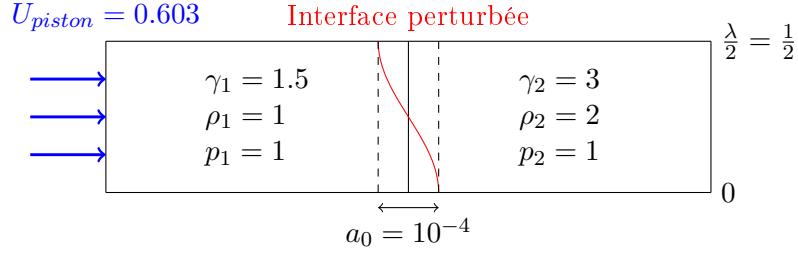


FIGURE 5.27 – Configuration initiale pour l’étude de l’instabilité de Richtmyer-Meshkov.

L’amplitude de la perturbation est définie par

$$a(t) = \frac{x_{per}(t) - x_{unper}(t)}{a_0}, \quad (5.1)$$

où x_{per} (resp x_{unper}) correspond à la position de l’interface initialement perturbée (resp non perturbée). L’interface perturbée est initialement définie par la position des noeuds au niveau de l’interface de la manière suivante

$$\forall y \in \left[-\frac{\lambda}{2}, \frac{\lambda}{2}\right], x(y) = a_0 \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}y\right).$$

On observe alors l’évolution de cette perturbation au cours du temps (voir figure 5.28), où le domaine initial est de dimension $[-5, 4.2] \times [0, 0.5]$ discrétisé par un maillage 460×25 . L’interface est initialement positionnée en $x = 0$. On remarque que, sur ce cas, seul notre schéma permet d’obtenir une évolution linéaire de l’amplitude. De plus, son évolution est très proche de celle donnée par la théorie linéaire. Les résultats obtenus avec notre schéma sont proches de ceux obtenus avec les extensions de GLACE et EUCCLHYD à l’ordre 2 (voir [Maire 2009]). On peut voir sur la figure 5.29 que notre schéma capture la seconde composante de la vitesse et donc les vortex qui se forment au niveau de l’interface alors que ceux-ci sont largement dissipés avec GLACE et EUCCLHYD.

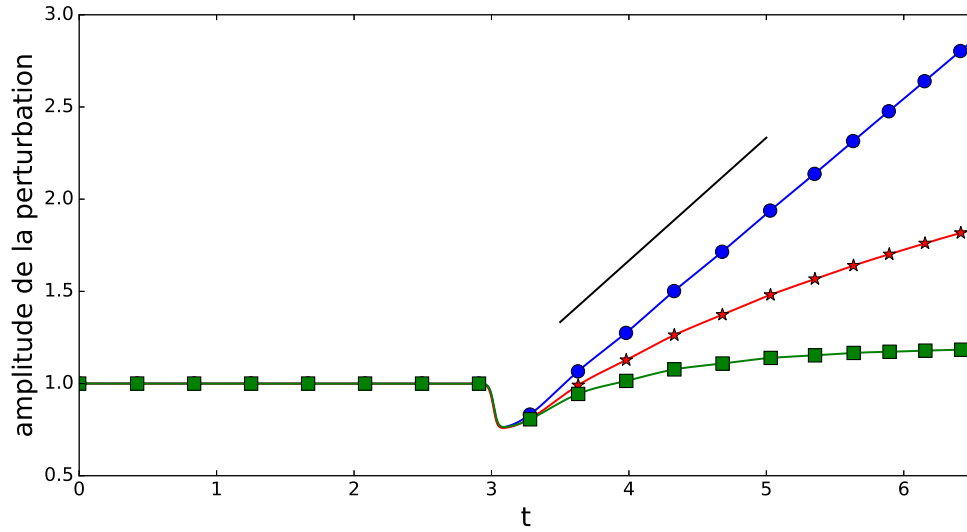


FIGURE 5.28 – Instabilité de Richtmyer-Meshkov. Évolution de l’amplitude de la perturbation au cours du temps pour notre schéma (●), GLACE (★), EUCCLHYD (■) et théorie linéaire.

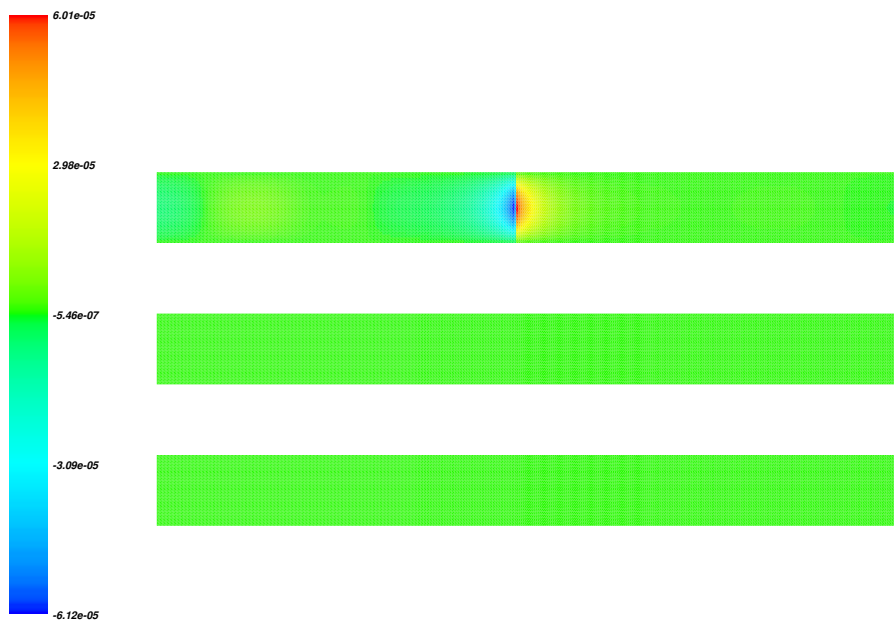


FIGURE 5.29 – Instabilité de Richtmyer-Meshkov. Profil de la deuxième composante de la vitesse pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 6.5$.

Ce comportement est lié avec l'utilisation d'une unique pression au niveau de chaque noeud. En effet, nous avons modifié GLACE et EUCCLHYD en définissant une unique pression au niveau de chaque noeud en calculant la moyenne pondérée par l'inverse de l'impédance acoustique des pressions nodales définies par leurs solveurs respectifs. Dans ce cas, comme on peut le voir sur la figure 5.30, les schémas modifiés permettent d'obtenir le comportement linéaire de l'évolution de l'amplitude de la perturbation.

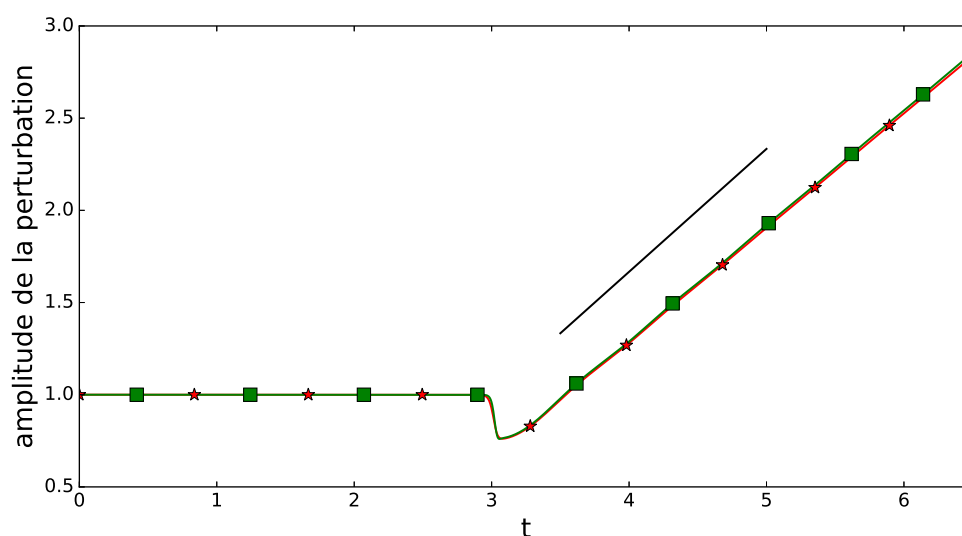


FIGURE 5.30 – Instabilité de Richtmyer-Meshkov. Évolution de l'amplitude de la perturbation au cours du temps pour les schémas GLACE (★) et EUCCLHYD (■) utilisant une unique pression nodale et théorie linéaire.

Notre avis est que l'utilisation d'une unique pression par noeud permet de réduire la dissipation.

5.2.7 Une première application à l'explosion vapeur

Nous nous intéressons maintenant à une première application à l'explosion vapeur. Le but est d'observer le comportement du schéma développé au chapitre 3 sur ce type d'application.

Nous rappelons que l'explosion vapeur est un phénomène qui se produit lors d'un apport soudain et important d'énergie dans l'eau liquide (typiquement un réchauffement instantané

5.2. TESTS MULTIDIMENSIONNELS

d'une partie du liquide) entraînant la vaporisation instantanée d'une partie du liquide. Ce phénomène pourrait se produire dans le cadre d'une centrale nucléaire. En effet, des crayons de combustible pourraient fondre, interagir avec l'eau liquide, et entraîner cette explosion. Nous allons modéliser l'eau liquide et sa vapeur d'eau grâce à des équations de type *stiffened gas* qu'on rappelle ci-dessous,

$$p(\tau, e) = (\gamma - 1) \frac{e - q - \pi\tau}{\tau} - \pi, \quad (5.2)$$

où γ , π , et q sont des constantes, qu'on prend comme étant celles définies par Saurel et al. [2008], grâce à la méthode proposée par Métayer et al. [2004a], et qu'on rappelle au tableau 5.7.

TABLE 5.7 – Coefficients des équations d'état.

| Constante | Eau liquide | Vapeur d'eau |
|--|-------------|--------------|
| γ | 2.35 | 1.43 |
| π (Pa) | 1E9 | 0 |
| q (J.kg ⁻¹) | -1167E3 | 2030E3 |
| c_v (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹) | 1816 | 1040 |

Le principe de ce test est de considérer une bulle de vapeur en surpression dans de l'eau, initialement, à pression atmosphérique. On suppose que la densité des deux fluides est égale, et que la température de la vapeur d'eau est de 1373K. On rappelle qu'il est alors possible de déterminer la pression de la vapeur d'eau avec

$$P(\tau, T) = (\gamma - 1) \frac{c_v T}{\tau} - \pi, \quad (5.3)$$

où T représente ici la température. On résume l'état initial des fluides dans le tableau 5.8

TABLE 5.8 – Explosion vapeur. État initial.

| Constante | Eau liquide | Vapeur d'eau |
|--|-------------|--------------|
| τ (m ³ .kg ⁻¹) | 1E-3 | 1E-3 |
| p (Pa) | 1E5 | 1.15E9 |
| \mathbf{u} (m.s ⁻¹) | 0 | 0 |

On considère le domaine $[-1, 1] \times [-1, 1]$ dans lequel la bulle de vapeur d'eau est centrée et de rayon initial 0.2 mètres. Le maillage utilisé est représenté sur la figure 5.31. Remar-

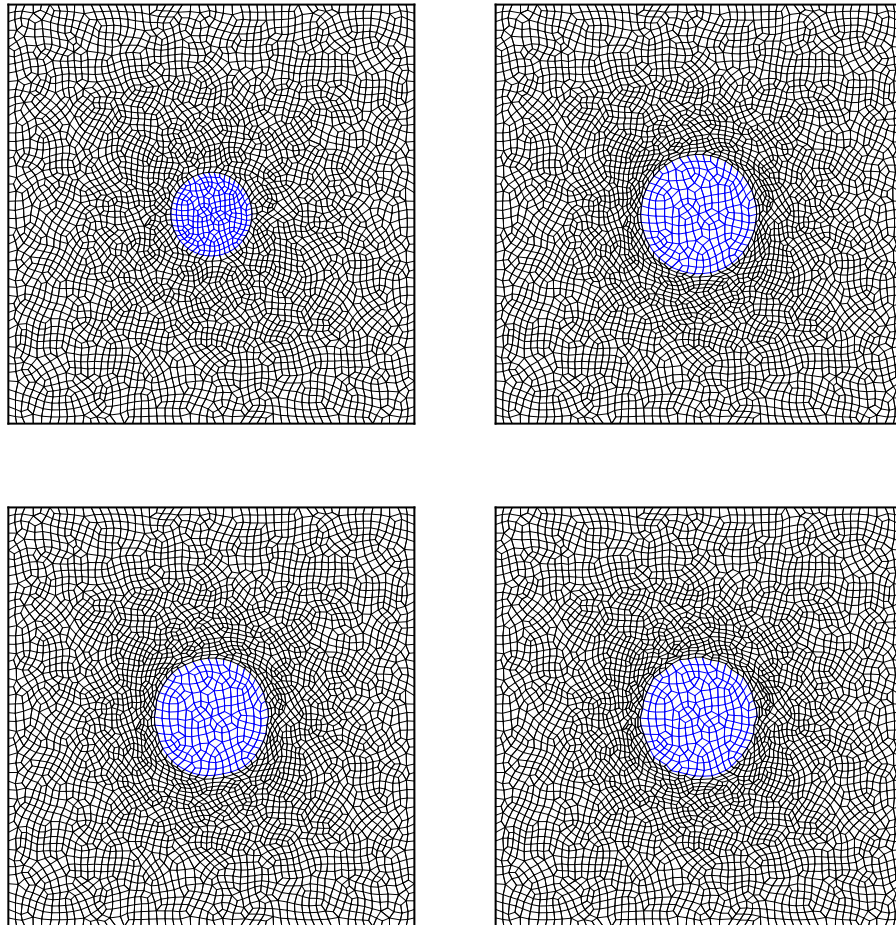


FIGURE 5.31 – Explosion vapeur. Maillage initial (haut gauche) et maillages au temps $t = 2.10^{-4}$ s pour notre schéma (haut droite), EUCCLHYD (bas gauche) et GLACE (bas droite)

quons que c'est un maillage quadrangulaire qui a pour seule particularité de représenter fidèlement l'interface entre l'eau et la vapeur.

Remarquons qu'il n'est pas possible d'obtenir de résultats analytiques sur ce cas test. Cependant, plusieurs critères peuvent être observés. Tout d'abord, le problème étant à symétrie cylindrique, on doit obtenir une solution ayant conservé cette symétrie. On observera donc l'évolution des variables physiques par rapport à la distance au centre du domaine. De plus, cette symétrie impose que la vitesse transverse soit nulle. Finalement, nous nous intéressons aussi à la déformation de l'interface, qui est censée rester circulaire par symétrie du problème.

On regarde sur la figure 5.32 l'interface à l'instant final. Remarquons que l'interface obtenue avec le schéma GLACE est très déformée alors que celles obtenues avec notre schéma et EUCCLHYD semblent bien conserver l'aspect circulaire. Par ailleurs, sur la figure 5.33, on trace une moitié de l'interface pour notre schéma et EUCCLHYD. On remarque que notre interface semble légèrement mieux conserver la forme cylindrique même si les deux interfaces sont assez proches.

D'autre part, on regarde (figure 5.34) l'évolution de la pression et de la densité en fonction de la distance au centre. Sur cette figure, on remarque que la symétrie cylindrique du problème semble bien conservée pour notre schéma et EUCCLHYD, alors que, GLACE donne de moins bons résultats.

De plus, la figure 5.35 nous donnant l'évolution des vitesses nodales radiales et transverses, montre que notre schéma a une erreur liée à la conservation de la symétrie du problème plus faible. En effet, les vitesses transverses, censées être nulles, sont deux fois plus faibles avec notre schéma que celles obtenues avec EUCCLHYD.

Nous comparons maintenant les résultats donnés par notre schéma, notre schéma modifié prenant en compte le principe fondamental de la dynamique et l'extension à l'ordre deux. Nous traçons sur la figure 5.36 les profils de pression au temps final. Nous remarquons de nouveau que la modification du schéma permet d'obtenir un résultat intermédiaire au schéma original et à l'extension à l'ordre deux.

Finalement, dans le cadre de la prévision d'un potentiel endommagement des structures

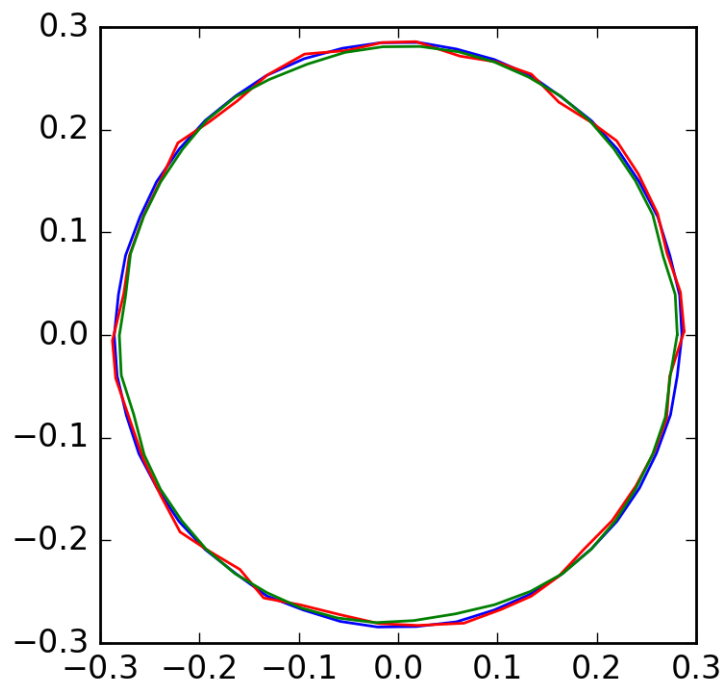


FIGURE 5.32 – Explosion vapeur. Interface pour `notre schéma`, `GLACE` et `EUCCLHYD` au temps $t = 2.10^{-4}$ s.

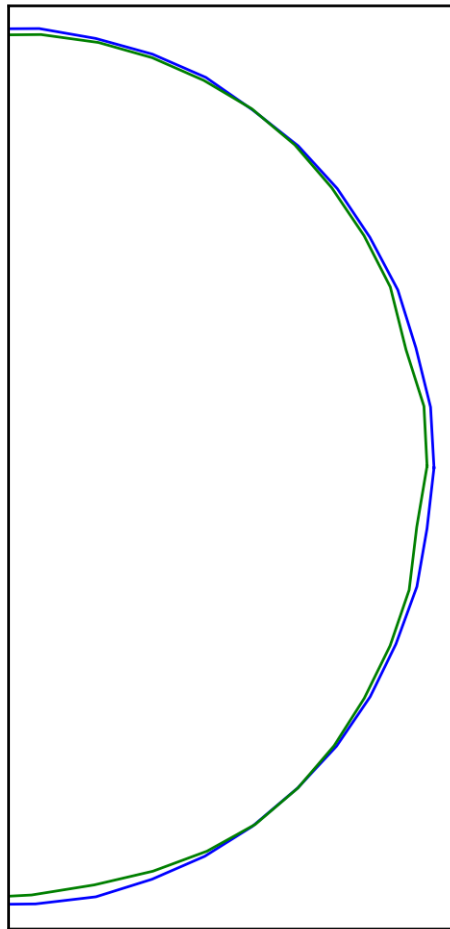


FIGURE 5.33 – Explosion vapeur. Partie droite de l'interface pour **notre schéma** et **EUC-CLHYD** au temps $t = 2.10^{-4}$ s.

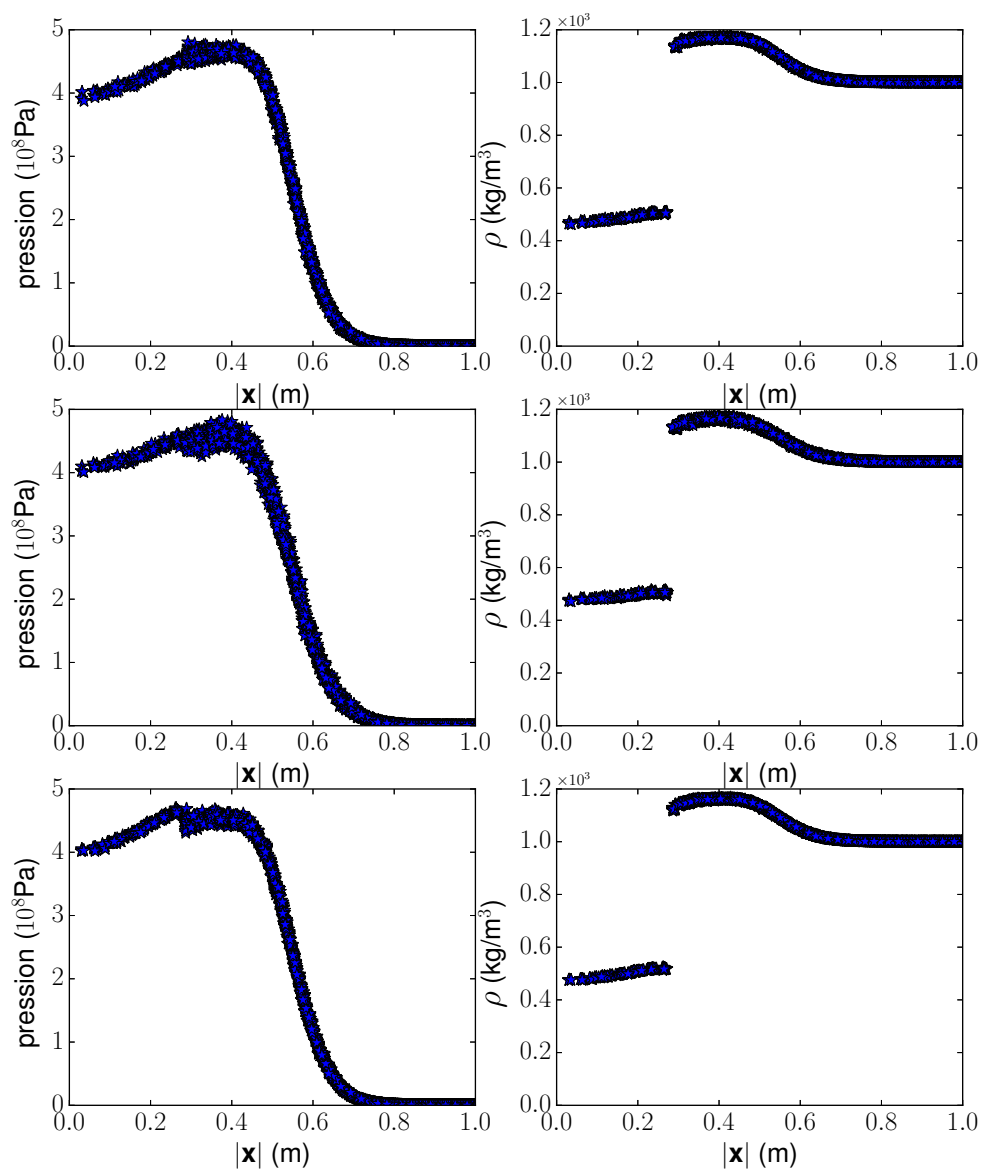


FIGURE 5.34 – Explosion vapeur. Pression (10^8 Pa, gauche) et densité (kg/m^3 , droite) en fonction de la distance au centre (m) pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 2.10^{-4}$ s.

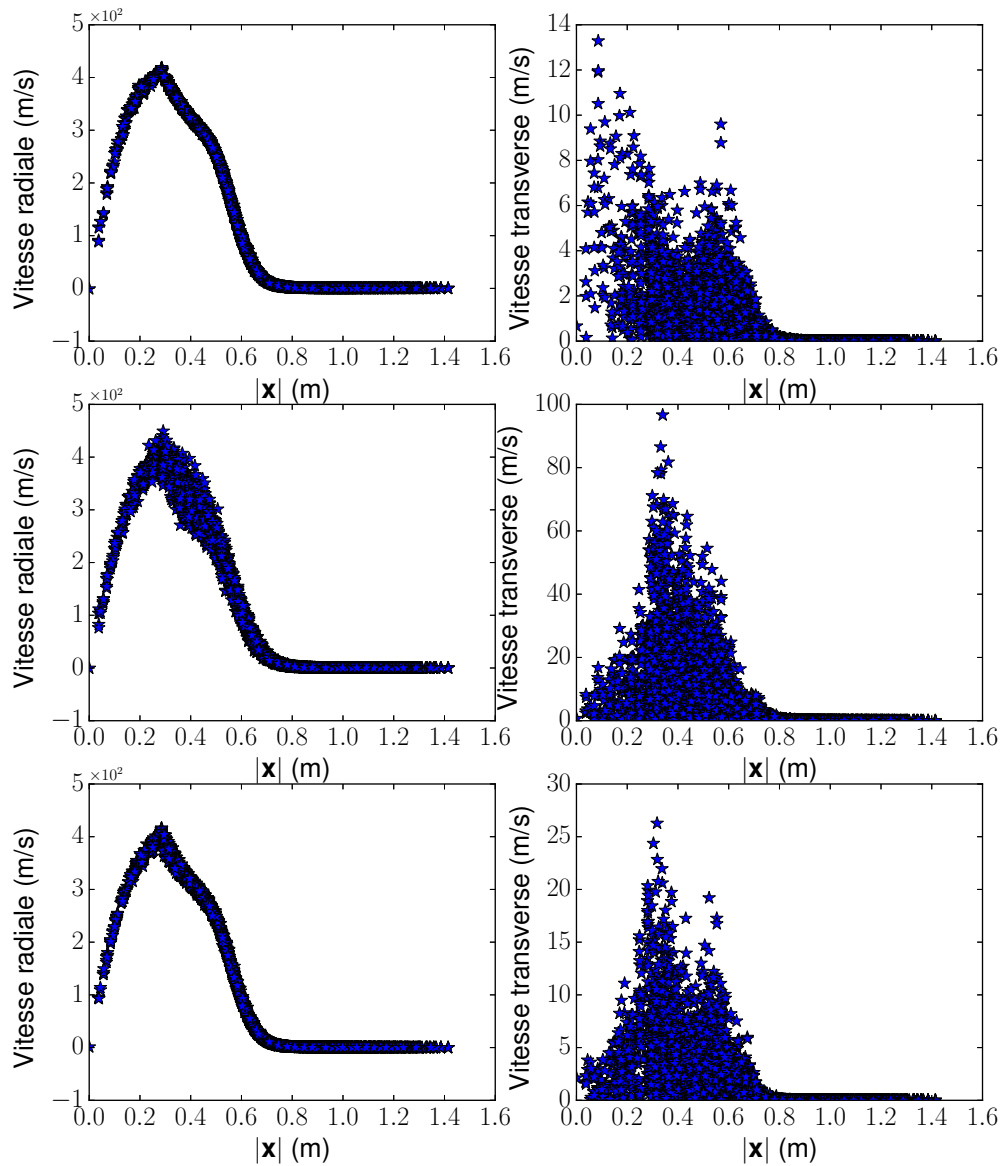


FIGURE 5.35 – Explosion vapeur. Vitesses radiale (m/s, gauche) et transverse (m/s, droite) nodales en fonction de la distance au centre (m) pour notre schéma (haut), GLACE (milieu) et EUCCLHYD (bas) au temps $t = 2.10^{-4}$ s.

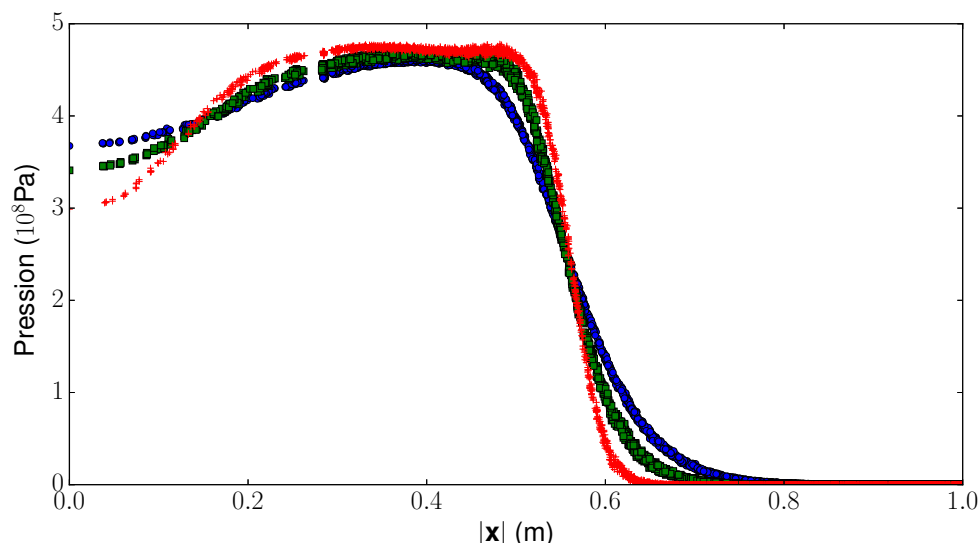


FIGURE 5.36 – Explosion vapeur. Pressions (10^8 Pa) nodales pour notre schéma (●), notre schéma modifié (■) et le schéma d'ordre deux (+) en fonction de la distance au centre (m) au temps $t = 2.10^{-4}$ s.

par ce phénomène, il est intéressant d'observer l'évolution des pressions au niveau des bords. Nous observons donc l'évolution de la pression sur un noeud d'un mur en fonction du temps. Nous allons aussi étudier l'influence de la quantité d'eau vaporisée en faisant varier la taille initiale de la bulle de vapeur. On considère pour ce cas, un domaine de dimension $[-2, 2] \times [-2, 2]$. On suppose que la bulle de vapeur en surpression est au centre du domaine. On trace l'évolution de la pression sur un noeud au bord, pour une bulle ayant initialement des rayons de $0.2m$, $0.1m$ et $0.05m$, sur la figure 5.37. On peut remarquer l'importante dépendance de l'évolution de la pression au bord à la taille initiale de la bulle. Il semblerait que le pic de pression soit proportionnel au rayon initial de la bulle.

En conclusion de ce cas test, qui correspond aux applications souhaitées du schéma numérique développé dans cette thèse, il est clair que ces applications peuvent être traitées sans problème par notre schéma numérique. De plus, celui-ci permet de diminuer les erreurs liées à la symétrie du problème. Finalement, sur les échelles de temps regardées ici, nous n'avons pas eu de problèmes liés à la déformation des mailles. Pour ce problème, avec notre schéma numérique, des calculs sont donc possibles afin d'étudier ce phénomène dans un cadre Lagrangien.

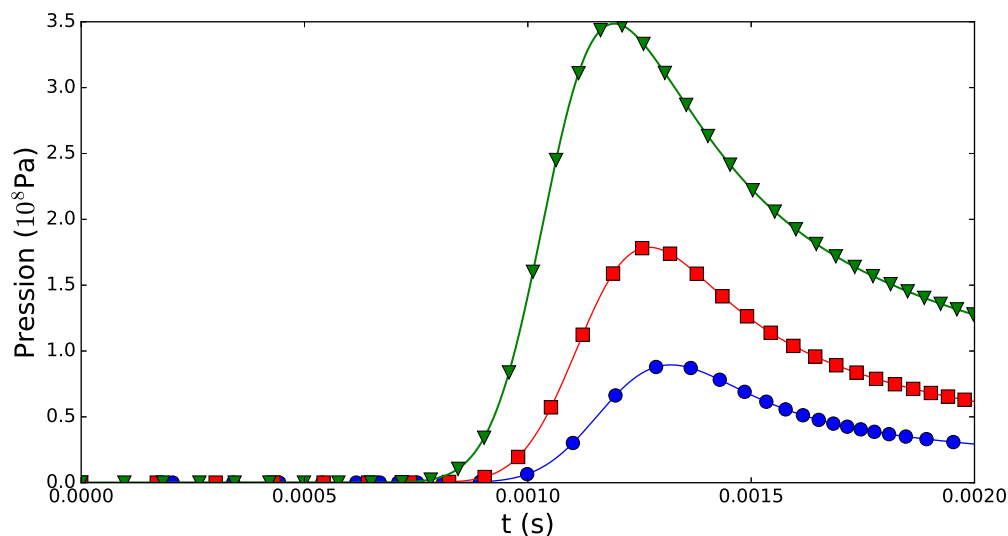


FIGURE 5.37 – Explosion vapeur. Évolution de la pression (10^8 Pa) au bord pour un rayon de bulle initial de 0.05 m (●), 0.1 m (■) et 0.2 m (▼) en fonction du temps (s).

5.2.7.1 Remarque sur le choix du maillage

Nous avons choisi, pour la simulation de l’explosion vapeur, un maillage formé de quadrangles. Ce choix n’est en fait pas anodin et nous voulons ici l’expliquer. Pour cela nous refaisons le cas test précédent sur le maillage triangulaire présenté sur la figure 5.38. Comme avec le maillage quadrangulaire, le maillage proposé ici suit fidèlement l’interface entre le liquide et la vapeur. Nous traçons sur la figure 5.39 l’évolution des pressions dans les mailles et nodales données par notre schéma numérique. On observe sur cette figure des oscillations sur la pression au centre des mailles au niveau de l’interface alors que les pressions nodales ne souffrent pas de ce défaut. De plus, précisons que les pressions nodales obtenues sont en accord avec les résultats obtenus sur ce cas test avec un maillage quadrangulaire. On peut voir sur la figure 5.40 que, la pression au niveau de l’interface est alternée d’une maille à l’autre. Ce phénomène, qui n’apparaît pas avec le maillage quadrangulaire utilisé précédemment, est dû au fait que pour deux mailles voisines au niveau de l’interface, l’une aura deux noeuds sur l’interface et un immergé dans un des deux fluides, alors que l’autre aura deux noeuds immergés dans un fluide et un seul sur l’interface, comme on peut le voir sur la figure 5.41. Dans ce cas, des “instabilités” en damiers peuvent se propager ce qui

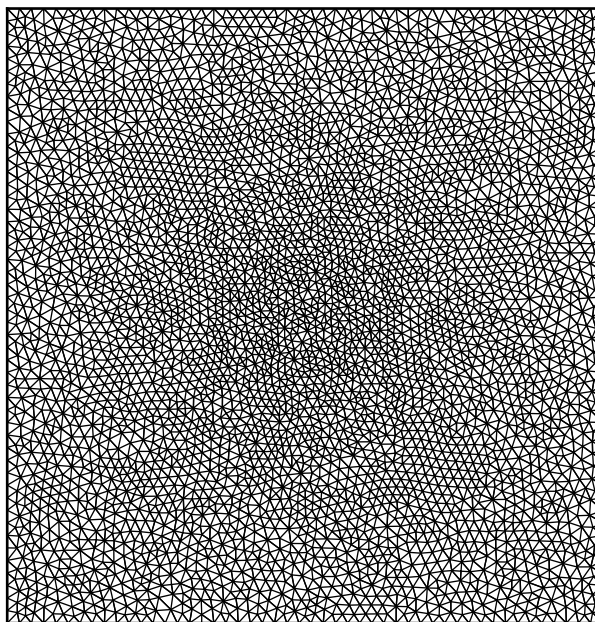
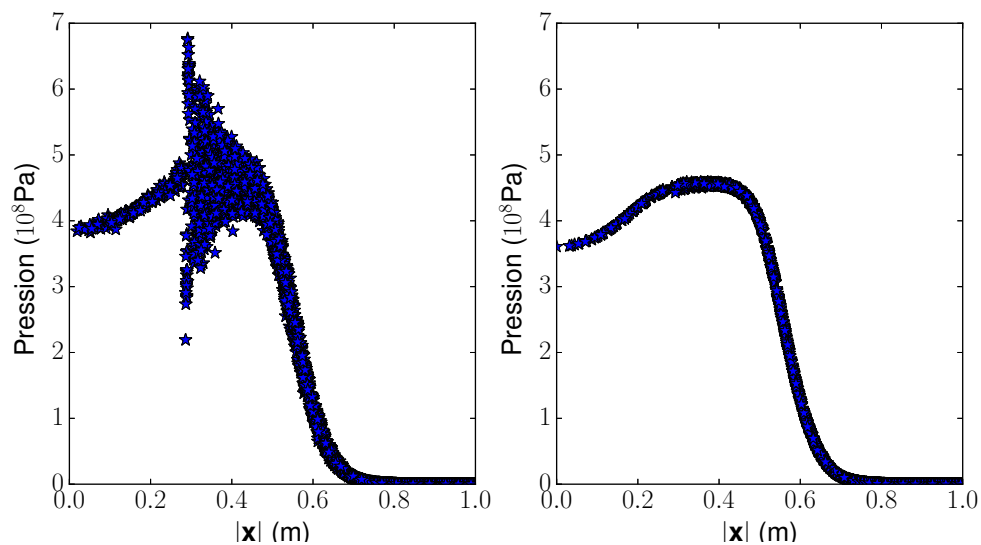


FIGURE 5.38 – Explosion vapeur. Maillage triangulaire initial.

FIGURE 5.39 – Explosion vapeur. Pression (10^8 Pa) au centre des mailles (gauche) et nodales (droite) en fonction de la distance au centre (m) au temps $t = 2.10^{-4}$ s.

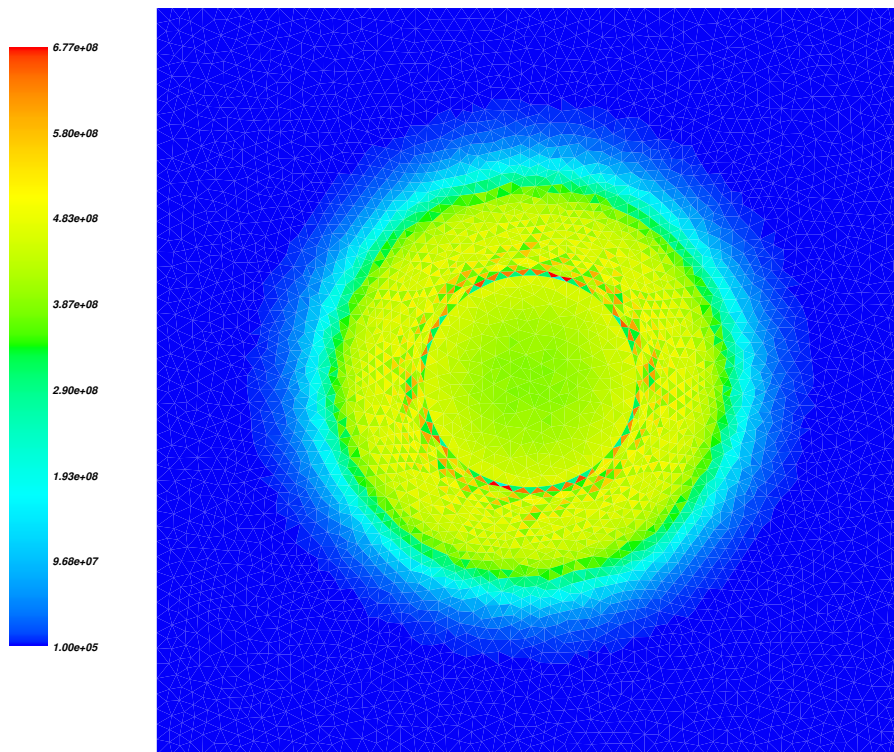


FIGURE 5.40 – Explosion vapeur. Pression (Pa) au centre des mailles au temps $t = 2.10^{-4}$ s.

5.3. CONCLUSION

donne les résultats ci-dessus sur les variables centrées. Il est aussi clair, sur cette figure, qu'en moyennant les valeurs sur des triangles ayant une arête en commun, on obtiendra un résultat "lisse" et cohérent. C'est d'ailleurs pour cela que les pressions nodales obtenues avec notre schéma sont correctes. En effet, elles sont définies comme une moyenne de la pression nodale \tilde{p}_r des cellules entourant le noeud. Ce résultat n'est pas le signe d'une

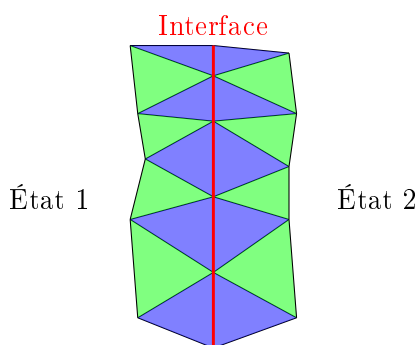


FIGURE 5.41 – Alternance dans un maillage triangulaire.

perte de stabilité. Cependant, nous précisons que l'utilisation de maillage triangulaire sur ce type de cas peut amener à des résultats "moins jolis", car ce sont les valeurs moyennes qu'il faudrait observer.

Remarque 24 *Même si ce phénomène est présenté avec notre schéma, il est clair qu'il se produit aussi avec GLACE et EUCCLHYD. Il devrait d'ailleurs se produire avec tout schéma de ce type.*

Précisons cependant que notre schéma a l'avantage de définir des pressions moyennes au niveau des noeuds, ce que ne donnent pas les schémas GLACE et EUCCLHYD.

Soulignons enfin que ce résultat n'est pas incohérent avec la propriété de consistance faible du schéma. En effet, la consistance faible permet uniquement de dire que le schéma est consistant en moyenne. Ce qui correspond à l'interprétation de ces résultats.

5.3 Conclusion

Pour conclure cette partie, on a pu voir que notre schéma donne des résultats semblables, sur les cas unidimensionnels, à EUCCLHYD et GLACE. De fait, tous ces schémas

5.3. CONCLUSION

sont plus ou moins équivalents, en dimension un, au schéma acoustique. On a aussi remarqué que, la modification permettant d'obtenir exactement le solveur acoustique n'avait que peu d'influence. Finalement, le schéma modifié, prenant en compte le principe fondamental de la dynamique dans le solveur nodal, permet d'obtenir des erreurs L^1 et L^∞ plus faibles que celles obtenues avec le schéma classique.

Les tests multidimensionnels nous ont permis de mettre en avant le domaine d'utilisation de notre schéma. En effet, sur des cas tests extrêmes comme Saltzmann ou Sedov, où les vitesses du son et les pressions considérées sont initialement très faibles, notre schéma se comporte mal. Les déformations de maillage sur ces cas sont très importantes. Nous avons regardé l'influence du non respect de l'inégalité entropique en utilisant des schémas hybrides. La question de savoir si ce défaut du schéma entraîne les mauvais résultats de notre schéma dans ce domaine d'application reste ouverte, mais nous avons l'impression que la faible dissipation de notre schéma joue un rôle plus important dans ce problème.

Nous avons aussi remarqué que dans les domaines d'applications proches de ceux qui nous intéressent, notre schéma se comporte bien. De plus, grâce au cas test de Saltzmann modifié ou du vortex dans une boîte, nous avons pu mettre en avant la faible dissipation de notre schéma. Nous avons aussi remarqué que cette faible dissipation permettait d'obtenir des comportements d'interfaces perturbées très proches de ce que la théorie linéaire prédit.

Finalement, nous avons pu voir grâce aux tests du tube à choc de Sod sur un maillage quelconque et au test d'explosion vapeur que notre schéma permettait de réduire sensiblement les erreurs de symétries. Ces erreurs sont diminuées de manière très forte au niveau des interfaces, ce qui permet d'obtenir des interfaces finaux qui respectent bien la symétrie initiale du problème.

Chapitre 6

Changement de phase

Dans les chapitres précédents, nous avons rappelé et développé des schémas numériques pour l'hydrodynamique Lagrangienne. Ces schémas numériques permettent de traiter plusieurs fluides et particulièrement l'eau liquide et sa vapeur. Cependant, ces schémas ne prennent pas en compte les transferts de masse. Lors de l'utilisation de lois d'états distinctes pour chaque phase, chaque maille contient le même fluide du début à la fin du calcul, ce qui peut amener, comme on peut le voir à la figure 6.2, à passer par des états thermodynamiques qui ne correspondent pas à la composition réelle de la cellule. Dans ce cas, on utilise la mauvaise loi d'état lorsque le fluide entre dans le dôme de saturation. Notre volonté est donc ici d'introduire le changement de phase. Il nous faut alors définir une loi d'état dans la zone de mélange, savoir quand l'utiliser, et y définir une vitesse du son.

Précisons tout de suite que notre intérêt se porte essentiellement sur le cas des changements de phase pour l'eau. La majorité des résultats présentés pour introduire le changement de phase sont issus de la thèse de Faccanoni [2009] et de l'habilitation à diriger des recherches de Helluy [2004] et s'appliquent à de nombreux fluides. Cependant, les schémas de principes tracés dans la suite correspondront au comportement de l'eau. Pour des résultats plus généraux et étudier les différents comportements possibles liés à ces transformations, nous référons le lecteur intéressé aux travaux de Jaouen [2001] et Voß et Ballmann [2005].

Pour être plus précis, nous nous intéressons à des changements de phase liquide-vapeur.

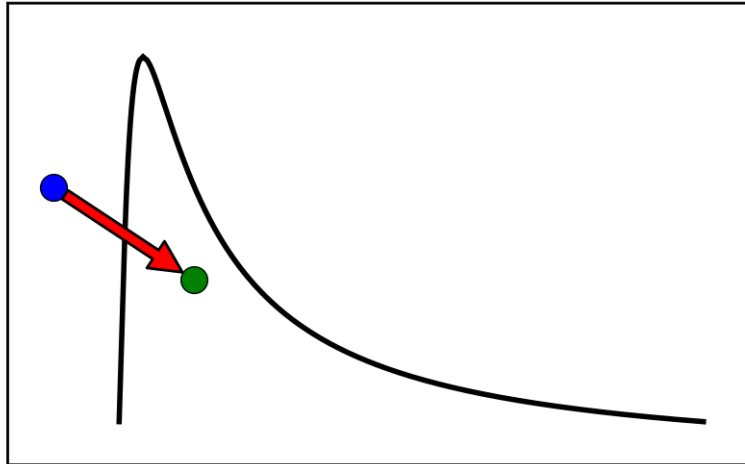


FIGURE 6.1 – Dôme de saturation dans le plan volume, pression. État initial et état après une itération d'un schéma numérique

Notre volonté est ici de déterminer si ce phénomène peut avoir un impact dans le cadre de la simulation de l'explosion vapeur. Nous chercherons aussi à déterminer les avantages de l'utilisation de codes Lagrangiens dans la simulation du changement de phase.

6.1 Théorie

Nous nous intéressons ici à la construction de la loi d'état de changement de phase lorsque deux équations de type *stiffened gas* sont utilisées pour modéliser le liquide et la vapeur. En effet, même s'il est possible de modéliser le changement de phase en utilisant une unique équation cubique, comme par exemple une équation de type Van Der Waals (voir [Voß et Ballmann 2005; Landau et Lifshitz 2013] par exemple) ou Peng-Robinson [Peng et Robinson 1976], qui permet de modéliser le liquide et la vapeur en même temps et qui prend en compte le changement de phase grâce à la construction de Maxwell, il est cependant connu que ces équations d'état ne sont pas forcément précises dans les domaines d'applications qui nous intéressent. Pour cela, nous considérons deux lois d'état, chacune décrivant une phase pure, et on construit une unique loi d'état qui décrit à la fois les phases pures et le chemin dans le dôme de saturation en utilisant le deuxième principe de

la thermodynamique.

6.1.1 Loi d'état à l'équilibre

Supposons donc qu'on ait deux équations d'états données par les entropies du liquide s_l et de la vapeur s_v . On rappelle que dans le cas d'équation d'état de type *stiffened gas*, ces équations d'état peuvent s'écrire

$$s_i(\tau_i, e_i) = c_{v,i} \ln(e_i - q_i - \pi\tau_i) + c_{v,i}(\gamma_i - 1) \ln(\tau_i) + m_i, \quad (6.1)$$

où $i = v$ ou l est l'indice correspondant au liquide ou à la vapeur. L'entropie du mélange hors d'équilibre s est alors définie par [Callen 1998]

$$s(\mathbf{w}_l, \mathbf{w}_v, y) = ys_l(\mathbf{w}_l) + (1 - y)s_v(\mathbf{w}_v), \quad (6.2)$$

où y correspond à la fraction massique du liquide et $\mathbf{w}_i = (\tau_i, e_i)$. On a noté $\tau_i = \frac{V_i}{M_i}$ le volume massique locale du fluide i et e_i l'énergie interne du fluide i . Par ailleurs, le volume massique global du mélange s'écrit

$$\tau = y\tau_l + (1 - y)\tau_v. \quad (6.3)$$

En effet, $y\tau_l = y\frac{V_l}{yM} = \frac{V_l}{M}$ et de même $\tau_v = \frac{V_v}{M}$ donc $\tau = \frac{V_l + V_v}{M} = \frac{V}{M}$. De même, on peut exprimer l'énergie interne du mélange avec

$$e = ye_l + (1 - y)e_v. \quad (6.4)$$

On connaît dans le code de calcul le volume massique global du mélange τ et l'énergie interne du mélange e . Il faut alors définir la composition du mélange et donc les variables correspondants à chaque fluide (τ_i , e_i et y). Notons qu'il nous faudra aussi définir la pression et la vitesse du son du mélange, nécessaires à l'utilisation des schémas décrits dans les chapitres précédents.

On définit alors, comme le suggère Faccanoni [2009]; Faccanoni et al. [2012], la loi d'état de changement de phase.

Définition 3 *La loi d'état de changement de phase est définie par la maximisation de l'entropie hors équilibre*

$$s^{eq}(\tau, e) = \max_{\mathcal{Q}(\tau, e)} s(\mathbf{w}_l, \mathbf{w}_v, y), \quad (6.5)$$

où

$$\mathcal{Q}(\tau, e) = \{(\mathbf{w}_l, \mathbf{w}_v, y), y \in [0, 1], \tau = y\tau_l + (1 - y)\tau_v, e = ye_l + (1 - y)e_v\}. \quad (6.6)$$

Cela revient à dire, comme le suggèrent les principes thermodynamiques (voir [Callen 1998] par exemple), que l'état d'équilibre est celui qui maximise l'entropie. Déterminer la loi d'état de changement de phase revient donc à résoudre un problème de maximisation. Le théorème suivant est alors démontré par Faccanoni [2009].

Théorème 5 *Soit (τ, e) un état thermodynamique. Soit s l'entropie de mélange hors équilibre donné par (6.2). Soit $(\mathbf{w}_l^*, \mathbf{w}_v^*, y) \in \overset{\circ}{\mathcal{Q}}(\tau, e)$. Alors on a équivalence entre*

- $(\mathbf{w}_l^*, \mathbf{w}_v^*, y)$ est solution du problème d'optimisation 6.5.
- $T_l(\mathbf{w}_l^*) = T_v(\mathbf{w}_v^*),$
- $p_l(\mathbf{w}_l^*) = p_v(\mathbf{w}_v^*),$
- $g_l(\mathbf{w}_l^*) = g_v(\mathbf{w}_v^*).$

où T représente la température, p la pression et g l'enthalpie libre.

La loi d'état de changement de phase peut alors se résumer grâce à la définition suivante

Définition 4 *Soit (τ, e) un état thermodynamique donné. Alors il existe deux possibilités*

1. *Si il existe $(\tau_l^*, e_l^*, \tau_v^*, e_v^*, y^*)$ solution du système*

$$\begin{aligned} p_l(\tau_l, e_l) &= p_v(\tau_v, e_v), \\ T_l(\tau_l, e_l) &= T_v(\tau_v, e_v), \\ g_l(\tau_l, e_l) &= g_v(\tau_v, e_v), \\ \tau &= y\tau_l + (1 - y)\tau_v, \\ e &= ye_l + (1 - y)e_v, \end{aligned} \quad (6.7)$$

tel que $y^* \in]0, 1[$. Alors l'état à l'équilibre est un mélange et on définit l'entropie à l'équilibre

$$s(\tau, e) = y^* s_l(\tau_l^*, e_l^*) + (1 - y^*) s_v(\tau_v^*, e_v^*).$$

2. *Si non, l'état défini par la donnée (τ, e) est monophasique. On choisit alors le fluide qui maximise l'entropie et l'entropie à l'équilibre est défini par*

- $s(\tau, e) = s_l(\tau, e)$ si $s_l(\tau, e) > s_v(\tau, e)$,
- $s(\tau, e) = s_v(\tau, e)$ si $s_l(\tau, e) < s_v(\tau, e)$.

De plus, on note p^{eq} la loi de pression à l'équilibre correspondant.

Remarque 25 *Le système (6.7) possède cinq équations pour cinq inconnues. En effet, τ et e sont connus, alors qu'on cherche à déterminer y , τ_l , τ_v , e_l et e_v . Il n'est cependant pas possible, dans le cadre d'une loi d'état de type *stiffened gas*, de résoudre ce problème de manière analytique. Des méthodes numériques seront donc utilisées.*

D'un point de vue programmation, nous cherchons toujours à résoudre (6.7). Si la fraction massique y obtenue est dans l'intervalle $]0, 1[$, on sera alors dans le cadre d'un état biphasique, sinon on aura un état monophasique.

Le système à cinq équations (6.7) peut être ramené à un système à deux équations. En effet, les pressions et températures de chaque fluide étant égales, on a, en utilisant des lois d'état de type *stiffened gas* et les relations (2.60) du premier chapitre

$$\begin{aligned}\tau_i &= c_{v,i}(\gamma_i - 1) \frac{T}{p + \pi_i} \\ e_i &= c_{v,i} T \frac{p + \gamma_i \pi_i}{p + \pi_i} + q_i.\end{aligned}\tag{6.8}$$

On parvient donc à

$$\begin{aligned}g_l(p, T) &= g_v(p, T), \\ \frac{\tau - \tau_v(p, T)}{\tau_l(p, T) - \tau_v(p, T)} &= \frac{e - e_v(p, T)}{e_l(p, T) - e_v(p, T)},\end{aligned}\tag{6.9}$$

où on rappelle que l'enthalpie libre, dans le cadre de *stiffened gas*, peut s'écrire

$$g(p, T) = (\gamma c_v - q') T - c_v \ln \left(\frac{T^\gamma}{(p + \pi)^{\gamma-1}} \right) + q,\tag{6.10}$$

où q' est défini par $q' = m + c_v \gamma \ln(c_v) + c_v(\gamma - 1) \ln(\gamma - 1)$.

Remarque 26 *La première relation de (6.9) permet de définir la pression de saturation en fonction de la température. On notera cette fonction $p^{\text{sat}} : T \rightarrow p^{\text{sat}}(T)$.*

Remarque 27 *Le système (6.9) définit naturellement la pression du mélange. Il reste cependant à définir la vitesse du son du mélange. Nous allons étudier deux possibilités pour définir cette vitesse du son : la première est d'utiliser la loi de Wood [1930], la seconde est de définir la vitesse du son correspondant à la loi d'état à l'équilibre défini ci-dessus.*

6.1.2 Vitesse du son

6.1.2.1 Loi de Wood

Définition 5 (Loi de Wood) *La loi de Wood définit la vitesse du son du mélange par*

$$\frac{\tau}{c^2} = \frac{\alpha_l \tau_l}{c_l^2} + \frac{\alpha_g \tau_g}{c_g^2}, \quad (6.11)$$

où c est la vitesse du son du mélange, c_i la vitesse du son du fluide i , $\alpha_l = y \frac{\tau_l}{\tau}$ la fraction volumique du liquide et $\alpha_g = 1 - \alpha_l$ celle du gaz.

6.1.2.2 Vitesse du son à l'équilibre

Déterminons maintenant la vitesse du son donné par la loi à l'équilibre. On rappelle la définition de la vitesse du son suivante.

Définition 6 *La vitesse du son à l'équilibre c est définie par*

$$c^2 = -\tau^2 \left. \frac{\partial p^{eq}}{\partial \tau} \right|_s, \quad (6.12)$$

où p^{eq} est la loi de pression à l'équilibre.

On rappelle la proposition, démontrée par exemple dans [Faccanoni 2009]

Proposition 18 *La vitesse du son à l'équilibre c d'un mélange ou d'une phase pure est toujours réelle et strictement positive. De plus, la vitesse du son à l'équilibre du mélange est toujours strictement plus petite que la vitesse du son des phases pures.*

Remarque 28 *Lors de l'utilisation de méthodes Eulérienne, l'interface entre deux phases est toujours diffusée. Or la vitesse du son à l'équilibre du mélange étant plus petite que celle des phases pures, cela peut amener à des propagations d'ondes acoustiques plus lentes au niveau de l'interface. On peut donc, déjà ici, remarquer que les méthodes Lagrangiennes auront l'avantage de ne pas avoir ce problème, l'interface n'étant pas diffusée.*

Rappelons que, dans une phase pure, il est possible d'exprimer les dérivées adiabatiques en terme de dérivées isothermes

$$\left. \frac{\partial}{\partial \tau} \right|_s = \left. \frac{\partial}{\partial \tau} \right|_T - \frac{\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_T}{\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau} \left. \frac{\partial}{\partial T} \right|_\tau. \quad (6.13)$$

Rappelons de plus, qu'on a la relation

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_T = \left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_\tau. \quad (6.14)$$

On peut donc réécrire

$$c^2 = -\tau^2 \left(\left. \frac{\partial p}{\partial \tau} \right|_T - \left(\left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_\tau \right)^2 \left(\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau \right)^{-1} \right). \quad (6.15)$$

La vitesse du son dans le cas d'un état monophasique est connue. En effet, on a dans le cas d'un *stiffened gas* la proposition suivante.

Proposition 19 (Vitesse du son d'une phase pure) *Soit (τ, p) un couple volume massique pression correspondant à un état monophasique. Alors la vitesse du son est donnée par*

$$c^2 = \gamma \tau (p + \pi). \quad (6.16)$$

Démonstration. Rappelons d'abord que

$$\begin{aligned} p(\tau, T) &= \frac{(\gamma-1)c_v T}{\tau} - \pi, \\ s(\tau, T) &= c_v \ln(c_v T) + c_v(\gamma-1) \ln(\tau) + s_0. \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial p}{\partial \tau} \right|_T &= -\frac{(\gamma-1)c_v T}{\tau^2} = -\frac{p+\pi}{\tau}, \\ \left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_\tau &= \frac{(\gamma-1)c_v}{\tau}, \\ \left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau &= \frac{c_v}{T}. \end{aligned}$$

D'où

$$\left(\left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_\tau \right)^2 \left(\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau \right)^{-1} = \frac{\gamma-1}{\tau} (p + \pi).$$

Finalement, on obtient

$$c^2 = \gamma \tau (p + \pi).$$

□

Il nous faut maintenant déterminer l'expression de la vitesse du son dans le cas d'un mélange. Dans ce cas, la pression dépend uniquement de la température. On a donc

$$c^2 = \tau^2 \left(\left. \frac{\partial p^{sat}}{\partial T} \right|_\tau \right)^2 \left(\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau \right)^{-1}. \quad (6.17)$$

6.1. THÉORIE

En général, l'expression de p^{sat} ne peut pas être déterminée analytiquement. On utilise donc la relation de Clausius-Clapeyron (voir Landau et Lifshitz [2013] par exemple) pour calculer $\left. \frac{\partial p^{sat}}{\partial T} \right|_{\tau}$ qui est donnée par

$$\frac{\partial p^{sat}}{\partial T} = \frac{h_v^{sat}(T) - h_l^{sat}(T)}{T(\tau_v^{sat} - \tau_l^{sat})}. \quad (6.18)$$

où h est l'enthalpie et où on a défini, pour toute variable thermodynamique ω ,

$$\omega_i^{sat}(T) = \omega_i(p^{sat}(T), T). \quad (6.19)$$

Il reste maintenant à déterminer l'expression de $\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau}$. Rappelons

$$\begin{aligned} s(\tau, T) &= y(\tau, T) s_l^{sat}(T) + (1 - y(\tau, T)) s_v^{sat}(T), \\ y(\tau, T) &= \frac{\tau - \tau_v^{sat}(T)}{\tau_l^{sat}(T) - \tau_v^{sat}(T)}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Donc

$$\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau} = \left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_{\tau} (s_l^{sat}(T) - s_v^{sat}(T)) + y(\tau, T) \frac{\partial s_l^{sat}(T)}{\partial T} + (1 - y(\tau, T)) \frac{\partial s_v^{sat}(T)}{\partial T}. \quad (6.21)$$

En utilisant la relation (6.2), on a

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_T &= \left. \frac{\partial y}{\partial \tau} \right|_T (s_l^{sat}(T) - s_v^{sat}(T)), \\ \left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau} &= \left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_{\tau} (s_l^{sat}(T) - s_v^{sat}(T)) + y(\tau, T) \frac{\partial s_l^{sat}(T)}{\partial T} + (1 - y(\tau, T)) \frac{\partial s_v^{sat}(T)}{\partial T}. \end{aligned} \quad (6.22)$$

Donc

$$\left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_{\tau} = - \frac{y(\tau, T) \frac{\partial \tau_l^{sat}(T)}{\partial T} + (1 - y(\tau, T)) \frac{\partial \tau_v^{sat}(T)}{\partial T}}{\tau_l^{sat}(T) - \tau_v^{sat}(T)}. \quad (6.23)$$

Finalement, pour des *stiffened gas*, on a aussi

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau_i^{sat}(T)}{\partial T} &= \frac{c_{v,i}(\gamma_i - 1)}{p^{sat}(T) + \pi_i} - \frac{c_{v,i}(\gamma_i - 1)T}{(p^{sat}(T) + \pi_i)^2} \frac{\partial p^{sat}(T)}{\partial T}, \\ \frac{\partial s_i^{sat}(T)}{\partial T} &= \frac{c_{v,i} \gamma_i}{T} - \frac{c_{v,i}(\gamma_i - 1)}{p^{sat}(T) + \pi_i} \frac{\partial p^{sat}(T)}{\partial T}. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Pour résumer, la vitesse du son, dans le cas d'un mélange, est calculée avec l'égalité (6.17) en utilisant les relations (6.18) et (6.21). De plus, pour calculer cette dernière relation on utilise (6.23) et (6.24).

6.1.2.3 Comparaison des vitesses du son

Nous voulons ici comparer le comportement de la vitesse du son à l'équilibre avec la vitesse du son donnée par la loi de Wood. On observe donc l'évolution de la vitesse du son en fonction de la fraction volumique sur la figure 6.2.

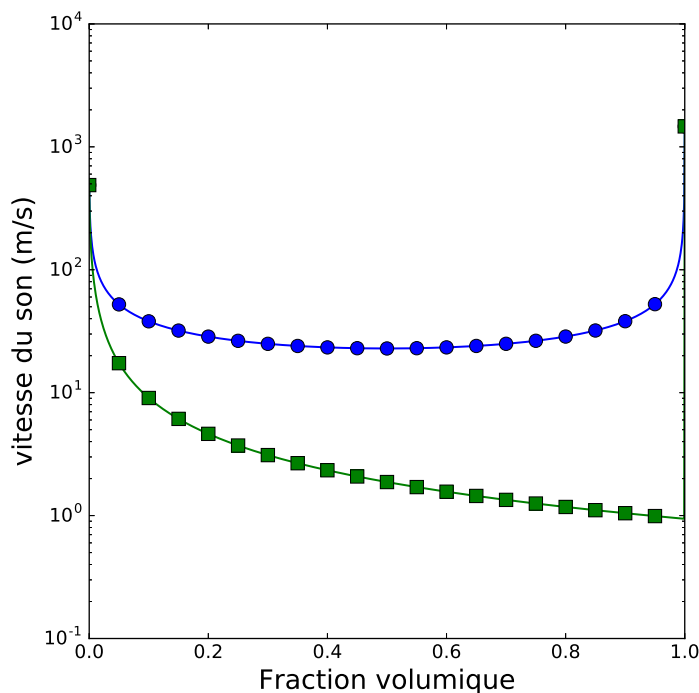


FIGURE 6.2 – Vitesse du son en fonction de la fraction volumique de liquide avec la loi de Wood (•) et la loi d'état à l'équilibre (■).

On peut remarquer que la vitesse du son à l'équilibre est discontinue. Ce phénomène est expliqué, par exemple, dans les travaux de Jaouen [2001]. Cependant la vitesse du son donnée par la loi de Wood est continue. D'autre part, on peut aussi remarquer que la vitesse du son à l'équilibre est beaucoup plus faible que celle donnée par la loi de Wood. Nous comparerons les résultats obtenus avec ces deux vitesses du son dans la suite.

Remarque 29 *La loi de Wood correspond à un déséquilibre en potentiels de Gibbs et températures des deux phases. Cette vitesse du son n'est donc pas celle qui est naturellement associée à la lois d'état à l'équilibre définie dans ce chapitre. D'autre part, il est aussi pos-*

sible de définir une vitesse du son qui correspond à un équilibre en pression et température des deux phases mais un déséquilibre en potentiel de Gibbs (voir [Lund et Flåtten 2010]).

6.2 Discrétisation

Nous souhaitons ici rapidement expliquer de quelle manière le changement de phase est en pratique intégré dans nos schémas numériques. Alors qu'il est classique d'utiliser des méthodes de relaxation pour intégrer le changement de phase (voir [Faccanoni 2009; Faccanoni et al. 2012]), nous utiliserons ici directement la loi d'état à l'équilibre. Il nous reste cependant à expliquer la méthode numérique utilisée pour déterminer cette loi d'équilibre, et en particulier résoudre (6.9).

6.2.1 Méthode numérique pour la loi d'état à l'équilibre

Nous expliquons dans cette partie l'algorithme utilisé pour résoudre le système (6.9). Avant de commencer, précisons que Faccanoni [2009] propose d'approcher $p^{sat} : T \rightarrow p^{sat}(T)$ par l'exponentielle d'un polynôme grâce à une méthode des moindres carrés, ce qui permet d'approcher alors la solution du système d'équations. Nous proposons ici une approche légèrement différente basée sur une résolution grossière du système suivi de l'utilisation d'une méthode Newton.

6.2.2 Résolution grossière

Notons T_0 une température initiale. Typiquement on peut prendre $T_0 = 283.15K$, ou une température initiale différente suivant l'intervalle de température que l'on souhaite couvrir. Soit ΔT un écart de température. On définit

$$\forall i, T_i = T_0 + k\Delta T. \quad (6.25)$$

Grâce à une méthode de Newton appliquée à la première égalité de (6.9), on détermine

$$p_i = p^{sat}(T_i). \quad (6.26)$$

Notons

$$\begin{aligned} w_i^1 &= \frac{\tau - \tau_v(p_i, T_i)}{\tau_l(p_i, T_i) - \tau_v(p_i, T_i)} \\ w_i^2 &= \frac{e - e_v(p_i, T_i)}{e_l(p_i, T_i) - e_v(p_i, T_i)} \end{aligned} \quad (6.27)$$

L'algorithme pour déterminer une première approximation de (p^*, T^*) solution de (6.9) est alors le suivant.

Algorithme 1 Calcul de (p^*, T^*)

Définir $i = 0$

Tant que $(w_i^1 - w_i^2)(w_{i+1}^1 - w_{i+1}^2) \geq 0$

Définir $i \leftarrow i + 1$

Fin

Définir $\theta = \frac{w_{i+1}^1 - w_{i+1}^2}{w_{i+1}^1 - w_i^1 + w_i^2 - w_{i+1}^2}$

Définir $T^* = \theta T_i + (1 - \theta) T_{i+1}$

Définir $p^* = \theta p_i + (1 - \theta) p_{i+1}$

Remarque 30 *Nous avons remarqué, dans le cadre des équations d'états utilisées que la suite $w^1 = (w_i^1)_i$ (resp $w^2 = (w_i^2)_i$) est croissante (resp décroissante) et que $w_0^1 < w_0^2$.*

Cet algorithme permet d'obtenir une première approximation de la solution recherchée.

6.2.3 Résolution précise

Supposons ici que nous avons utilisé l'algorithme précédent pour avoir une première approximation de la solution du système (6.9). Notons cette première solution approchée $(\tilde{p}^*, \tilde{T}^*)$. Pour améliorer la précision de cette première approximation, une simple méthode de Newton est alors appliquée pour résoudre (6.9) en prenant comme point de départ le couple $(\tilde{p}^*, \tilde{T}^*)$ précédemment calculé.

Remarque 31 *Il est connu que les méthodes de Newton nécessitent en général de prendre un point de départ assez proche de la solution. C'est donc ce que nous faisons ici. En fait, nous avons constaté qu'appliquer la méthode de Newton sans approcher la solution au préalable ne fonctionne pas ici.*

6.3 Quelques rappels sur le comportement de l'eau

Nous rappelons dans cette partie quelques généralités concernant le comportement de l'eau. Ces rappels nous permettront d'expliquer les résultats numériques obtenus dans la partie suivante.

6.3.1 Plan (τ, p)

On rappelle à la figure 6.3 le comportement des isothermes dans le plan volume pression. Les courbes isothermes rappellent le fait que le changement de phase se fait à pression et température constantes. Dans le dôme de saturation les isothermes correspondent donc aux isobares.

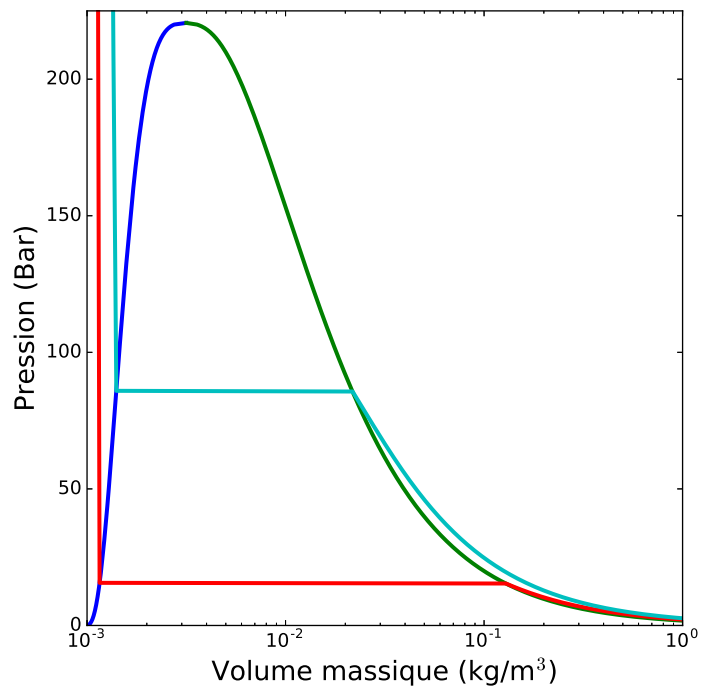


FIGURE 6.3 – Courbe d'ébullition, courbe de rosée et isothermes dans le plan volume (kg/m^3) pression (bar).

6.3.2 Plan TS

On trace le dôme de saturation dans le plan entropie-température sur la figure 6.4. Sur cette figure les isentropes correspondent aux droites verticales. Cela montre que l'eau n'a pas un comportement rétrograde (voire [Jaouen 2001; Voß et Ballmann 2005]).

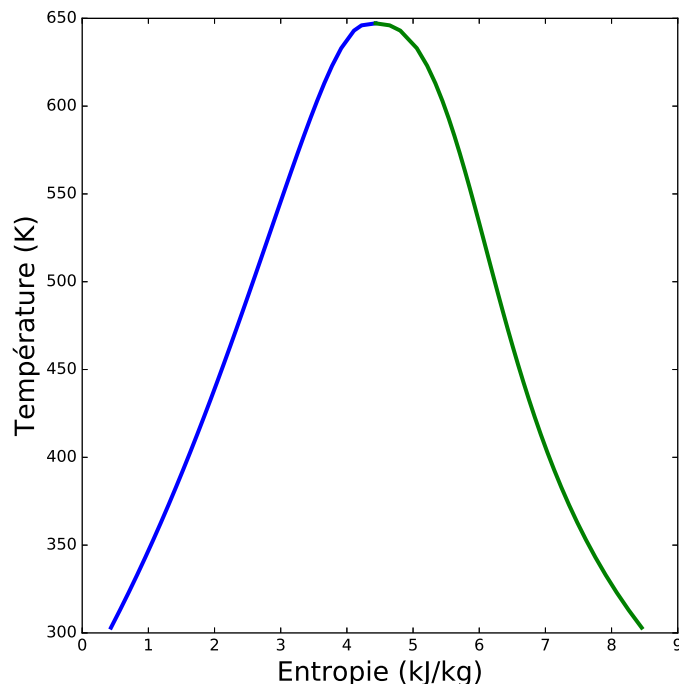


FIGURE 6.4 – Courbe d'ébullition et courbe de rosée dans le plan entropie (kJ/kg) température (K).

Remarque 32 *Il est évident sur la figure 6.4, qu'une compression adiabatique de vapeur d'eau ne peut pas entraîner de condensation. En effet, une telle transformation ne peut mener qu'à une augmentation de la température de la vapeur d'eau et donc, à ce que l'état thermodynamique de la vapeur d'eau s'écarte de la courbe de saturation.*

6.4 Quelques résultats numériques

Avant de présenter les applications numériques, nous précisons que les coefficients des *stiffened gas* utilisés pour la modélisation de l'eau liquide et de sa vapeur sont ceux définis par Saurel et al. [2008] donnés au tableau 5.7 et qu'on rappelle ci dessous.

TABLE 6.1 – Coefficients de l'équation d'état.

| Constante | Eau liquide | Vapeur d'eau |
|--|-------------|--------------|
| γ | 2.35 | 1.43 |
| π (Pa) | 1E9 | 0 |
| q (J.kg ⁻¹) | -1167E3 | 2030E3 |
| q' (J.kg ⁻¹) | 0 | -23.307E3 |
| c_v (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹) | 1816 | 1040 |

Dans ce tableau, on donne la valeur du coefficient q' et de m . On rappelle que les deux coefficients sont liés par la relation

$$m = q' - c_v \gamma \ln(c_v) - c_v (\gamma - 1) \ln(\gamma - 1). \quad (6.28)$$

6.4.1 Cavitation

Intéressons nous dans un premier temps au cas de la détente unidimensionnelle d'eau liquide. Le domaine initial est de taille $[0, 1] \times [0, 1]$ et rempli d'eau liquide dont l'état est initialement défini par

$$(\tau, u, v, e)(t = 0, x) = \begin{cases} \left(1.2\text{E-}3 \text{ kg/m}^3, -100 \text{ m/s}, 0 \text{ m/s}, 9.64141\text{E}5 \text{ J} \right) & \text{si } x < 0.5, \\ \left(1.2\text{E-}3 \text{ kg/m}^3, 100 \text{ m/s}, 0 \text{ m/s}, 9.64141\text{E}5 \text{ J} \right) & \text{sinon.} \end{cases}$$

Nous imposons la pression extérieure au niveau des bords gauche et droit comme étant égale à la pression initiale de l'eau liquide qui est de 47.533625 MPa. Les deux autres bords agissent comme des murs glissants. Le domaine est discrétisé grâce à un maillage cartésien 1000×3 . On trace dans un premier temps, sur la figure 6.5, la pression lorsque le changement de phase n'est pas pris en compte. On remarque que, dans ce cas, la pression devient négative, ce qui est physiquement faux. En fait, les endroits où la pression devient négative aurait dû se vaporiser.

On observe sur la figure 6.6 l'évolution de la pression, fraction massique, densité et vitesse au temps $t = 0.0001$ s lorsque que le changement de phase est pris en compte.

6.4. QUELQUES RÉSULTATS NUMÉRIQUES

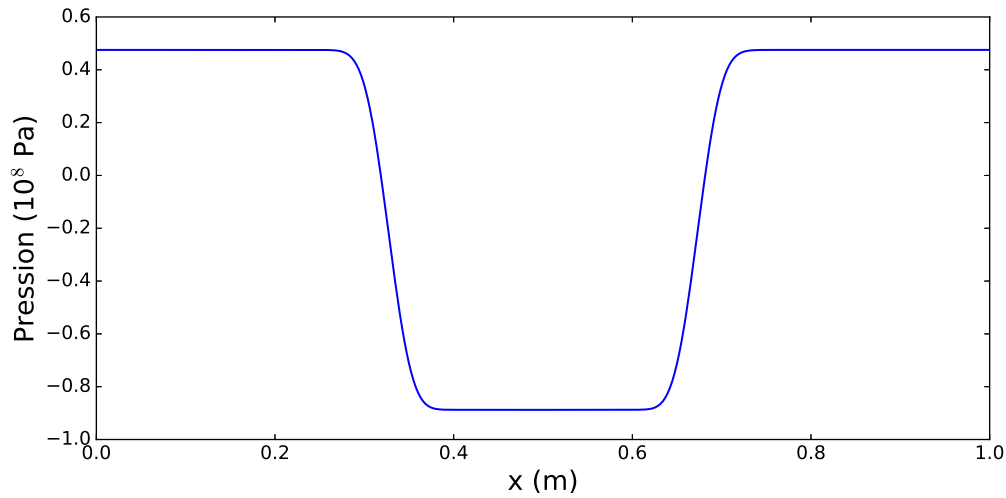


FIGURE 6.5 – Cavitation. Profil de pression (10^8Pa) sans changement de phase au temps $t = 0.0001$ s.

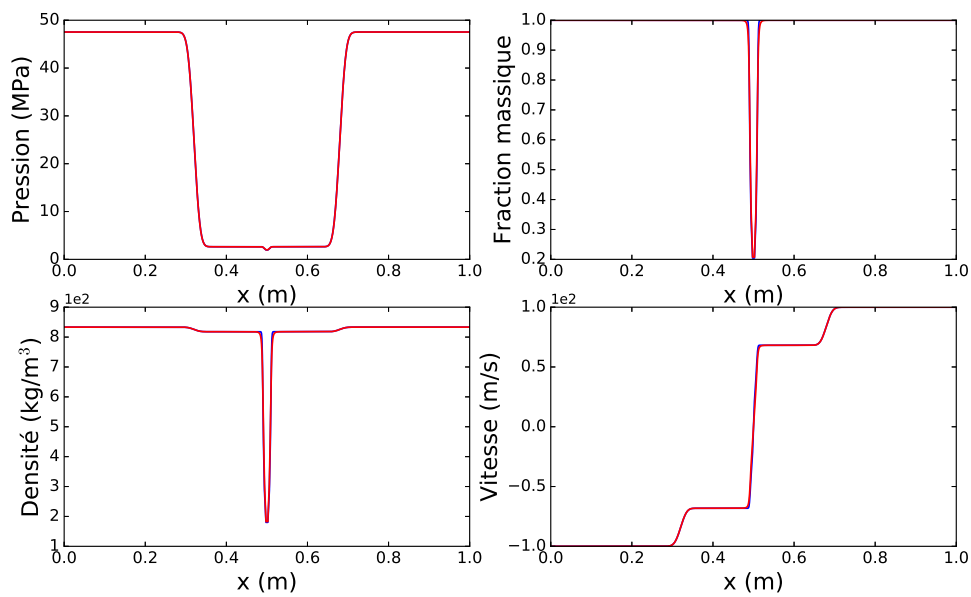


FIGURE 6.6 – Cavitation. Profils de pression (MPa , haut gauche), fraction massique (haut droit), densité (kg/m^3 , bas gauche) et vitesse (m/s , bas droit) avec la **vitesse de Wood** et la **vitesse à l'équilibre** au temps $t = 0.0001$ s.

On remarque alors que la pression reste positive. On voit aussi qu'une partie du liquide s'est bien vaporisé. Que l'on utilise la vitesse du son à l'équilibre ou celle donnée par la loi de

6.4. QUELQUES RÉSULTATS NUMÉRIQUES

Wood, les résultats sont très proches. L'unique différence porte sur le fait que la continuité de la loi de Wood se répercute très légèrement au niveau de l'interface de vaporisation.

6.4.2 Compression d'une bulle

Le deuxième cas que nous regardons, lui aussi unidimensionnel, est le cas de la compression d'une bulle de vapeur proche de la saturation. Le cas est représenté sur la figure 6.7.

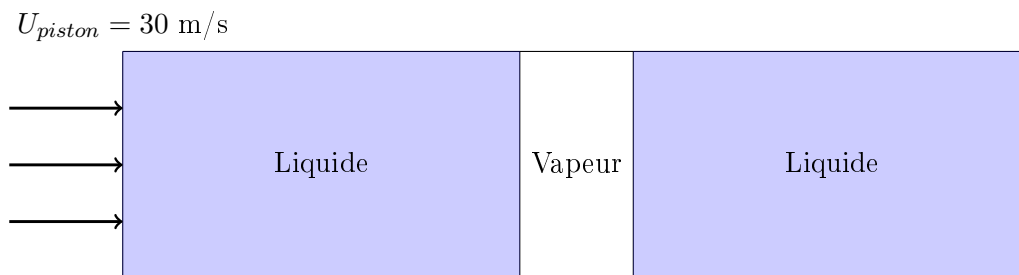


FIGURE 6.7 – Compression d'une bulle de vapeur.

Les données utilisées sont celles proposées par Faccanoni [2009]; Faccanoni et al. [2012] qu'on rappelle ci-dessous

TABLE 6.2 – Compression d'une bulle de vapeur.

| | Eau liquide | Vapeur d'eau |
|--------------------------------|--------------|--------------|
| $\rho \text{ (kg/m}^3\text{)}$ | 929.7941874 | 4.091902657 |
| $\mathbf{u} \text{ (m/s)}$ | $\mathbf{0}$ | $\mathbf{0}$ |
| $p \text{ (MPa)}$ | 0.8034337432 | 0.8034337432 |

Le domaine est de dimension $[0, 1] \times [0, 1]$ discrétisé par un maillage cartésien 1000×3 . Ce domaine est rempli d'eau proche de la saturation, avec en son centre une "bulle" de vapeur de rayon $0.1m$. Le bord gauche du domaine agit comme un piston de vitesse $30m/s$, alors que les autres bords sont des murs.

Nous traçons sur la figure 6.8 la pression, fraction volumique, densité et vitesse au temps $t = 0.003s$. On remarque sur cette figure que les résultats obtenus avec vitesse du son à l'équilibre ou la loi de Wood sont très proches. Remarquons aussi que la bulle reste entièrement à l'état vapeur contrairement aux résultats obtenus par Faccanoni [2009] sur ce

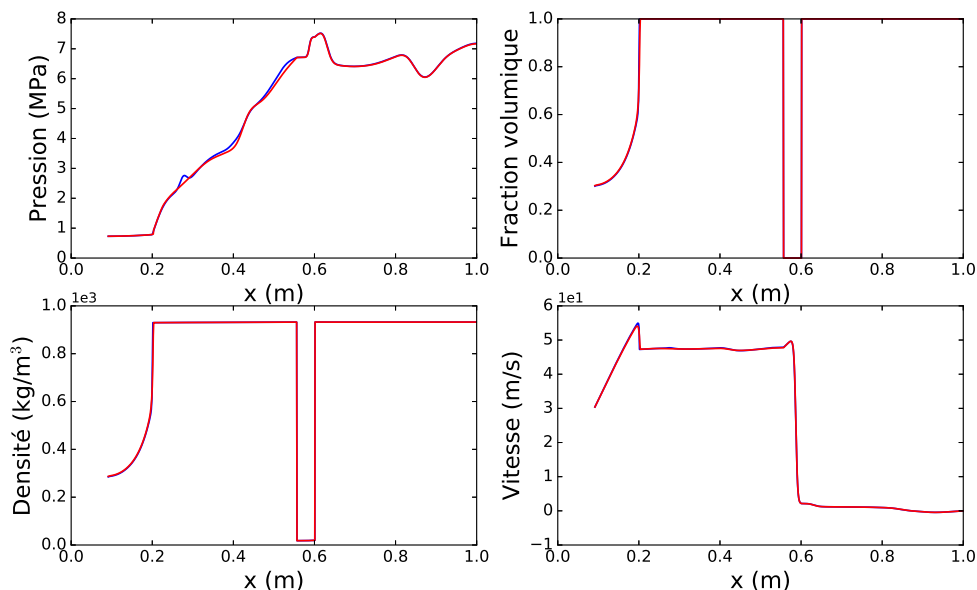


FIGURE 6.8 – Compression d’une bulle de vapeur. Pression (MPa , haut gauche), fraction massique (haut droit), densité (kg/m^3 , bas gauche) et vitesse (m/s , bas droit) avec la vitesse de Wood et la vitesse à l’équilibre au temps $t = 0.003$ s.

cas. En effet, en observant la figure 6.4, on remarque que cette bulle ne doit pas se condenser car la compression est adiabatique, ce qui correspond aux résultats obtenus ici. De notre point de vue, l’utilisation d’un algorithme Eulérien, comme celui proposé par Faccanoni [2009], entraîne nécessairement la diffusion des interfaces. C’est alors ce phénomène qui provoque la condensation de la bulle. Il est évident que la non diffusion des interfaces grâce à l’utilisation d’une description Lagrangienne, est un avantage certain sur ce cas. En effet, il n’est pas nécessaire de raffiner le maillage pour obtenir un résultat corroborant le comportement physique de l’eau.

Finalement, nous traçons sur la figure 6.9 le chemin thermodynamique d’une cellule initialement liquide proche du piston et d’une cellule de vapeur dans le plan volume pression. On remarque que le chemin thermodynamique de la vapeur suit la courbe isentropique, ce qui est normal car la transformation est supposée adiabatique. En ce qui concerne celui du liquide, on remarque que suite à la compression, une surpression se forme proche du piston, ce qui amène en fait l’eau au dessus du point critique. Même si les résultats qui

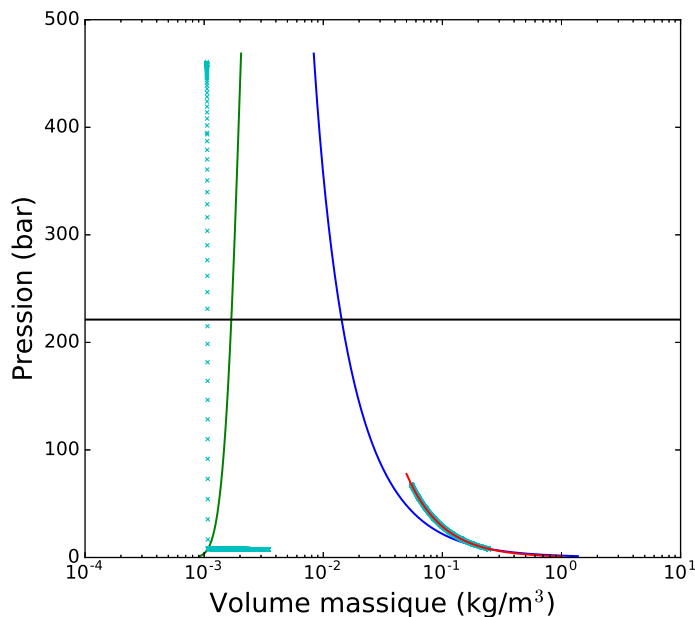


FIGURE 6.9 – Compression d’une bulle de vapeur. Courbe d’ébullition, courbe de rosée, chemins thermodynamiques des cellules (x), courbe isentropique et pression critique.

suivent cette surpression (dépression suivie d’une vaporisation de l’eau liquide située au bord du piston) semblent physiquement corrects, on peut s’interroger sur la pertinence de l’utilisation d’une loi d’état de type *stiffened gas* au-delà du point critique.

6.4.3 Application à l’explosion vapeur

On s’intéresse maintenant au cas test exposé à la partie 5.2.7. La différence est qu’ici nous autoriserons le changement de phase. La question principale est de savoir si ce phénomène a un impact ou non pour la simulation de ce cas test. On trace sur la figure 6.10 la pression, la fraction volumique, et les vitesses nodales radiale et transverse. On remarque sur cette figure qu’on obtient les mêmes résultats que ceux exposés pour notre schéma numérique à la partie 5.2.7. Le changement de phase n’intervient pas ici.

Remarque 33 *En fait, on ne prend pas en compte le changement de phase au-delà du point critique. À l’échelle de temps que l’on considère ici ce phénomène ne peut donc pas intervenir.*

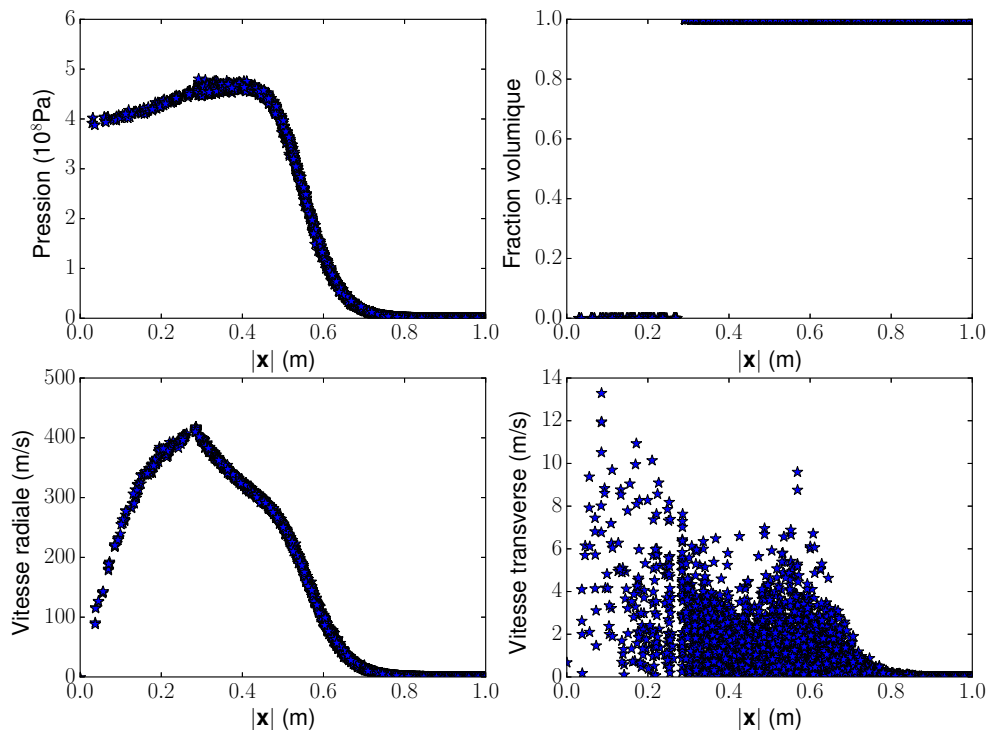


FIGURE 6.10 – Explosion vapeur avec changement de phase. Pression (10^8 Pa, haut gauche), fraction volumique (haut droit), vitesse nodale radiale (m/s, bas gauche) et transverse (m/s, bas droit) en fonction de la distance au centre (m) au temps $t = 2 \cdot 10^{-4}$ s.

On peut cependant, s'interroger sur le choix de l'équation d'état pour un fluide situé au-delà du point critique. En effet, les transitions qu'il faudrait en fait étudier, correspondent au passage du domaine liquide ou vapeur au domaine critique.

6.5 Comparaison de lois d'état

6.5.1 Les lois d'état

Dans cette partie, nous nous intéressons à la simulation de l'explosion vapeur. Nous mettons en avant l'importance du choix de la loi d'état utilisée dans la simulation de ce phénomène. Nous comparons ici deux méthodes pour modéliser l'eau.

1. Deux lois d'état de type *stiffened gas* pour modéliser le liquide et la vapeur comme

ce qui a été fait précédemment.

2. Une loi d'état de type Van Der Waals, qui permet de modéliser à la fois le liquide et la vapeur.

Lois d'état de type *stiffened gas* : Pour ces lois d'état, nous utilisons les coefficients proposés par Saurel et al. [2008] reportés dans le tableau 5.7. Rappelons que l'utilisation de deux lois d'état distinctes pour chaque phase ne permet pas de définir de point critique. Pour un état initialement liquide, la loi d'état correspondant au liquide (resp vapeur) sera toujours utilisée si ce liquide (resp vapeur) passe dans le domaine critique. Nous avons aussi conscience que les coefficients proposés par Saurel et al. [2008] n'ont pas été définis pour avoir une bonne approximation de la zone critique.

Loi d'état de Van Der Waals : Rappelons que la loi d'état de Van Der Waals peut s'écrire

$$\begin{aligned} p(\tau, e) &= \frac{r}{c_v} \frac{e + \frac{a}{\tau}}{\tau - b} - \frac{a}{\tau^2}, \\ c^2(\tau, e) &= \left(e + \frac{a}{\tau}\right) \left(\frac{r}{c_v} \left(\frac{r}{c_v} + 1\right) \frac{\tau^2}{(\tau - b)^2}\right) - 2\frac{a}{\tau}, \end{aligned} \tag{6.29}$$

où $r = 8,3144621$ est la constante molaire des gaz, a est une constante liée au fluide considéré permettant de prendre en compte l'attraction des atomes, b est une constante représentant le volume occupé par une mole du fluide, c_v est la capacité thermique molaire à volume constant et c est la vitesse du son. Dans le cadre de cette application nous prenons

$$\begin{aligned} a &= 0.5536 \text{ Pa} \cdot (\text{m}^3/\text{mole})^2, \\ b &= 3.049 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mole}, \\ c_v &= 19.34 \text{ m}^3/\text{mole}/\text{K}. \end{aligned} \tag{6.30}$$

6.5.2 Application à un réacteur expérimental

Nous nous plaçons ici dans le cadre d'un réacteur expérimental. Les métaux utilisés pour le coeur du réacteur sont alors essentiellement en aluminium dont la température de fusion est de l'ordre de 1000°C . Remarquons de plus qu'en général la température de l'eau dans la piscine du réacteur est de l'ordre de 40°C et sa pression de 2 bar.

Pour initialiser le cas test, on utilise uniquement les données ci-dessus. En connaissant la pression et la température initiale de l'eau liquide, on peut facilement, avec les différentes

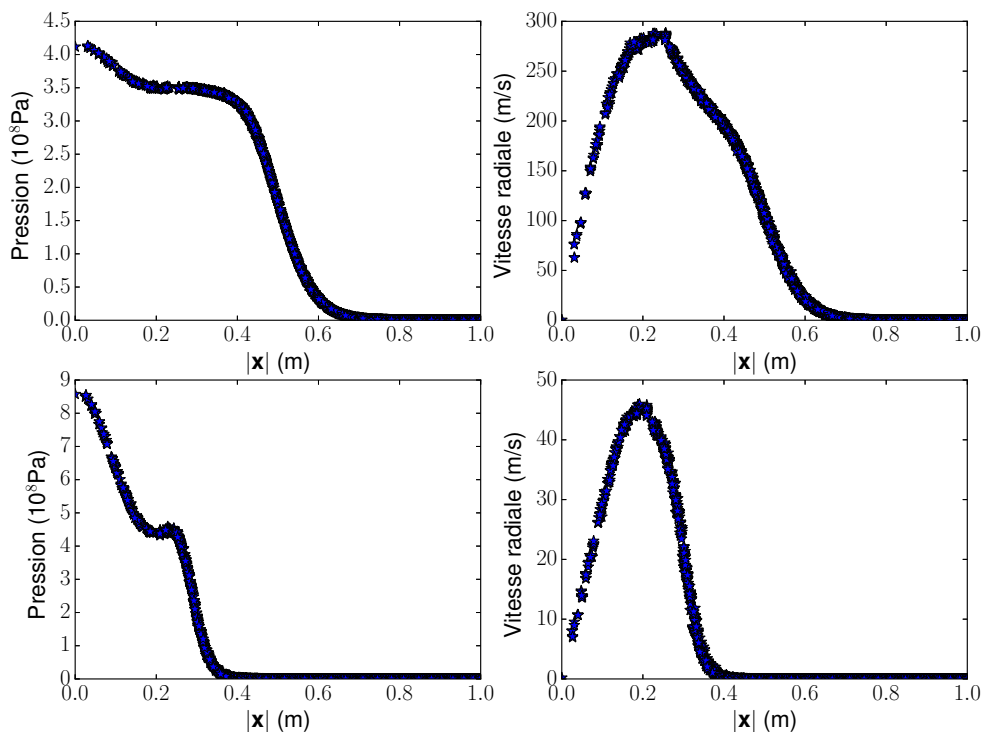


FIGURE 6.11 – Explosion vapeur. Comparaison entre l'utilisation de *stiffened gas* (haut) et Van Der Waals (bas). Pression (10^8 Pa, gauche) et vitesse radiale (m/s, droite) en fonction de la distance au centre (m) au temps $t = 2.10^{-4}$ s.

équations d'état utilisées, calculer sa densité ρ_{liq} et son énergie interne e_{liq} . Pour initialiser les variables associées à la vapeur, on suppose que sa densité est égale à la densité de l'eau liquide $\rho_{vap} = \rho_{liq}$. On peut ensuite déterminer son énergie interne en utilisant le fait que $T_{vap} = 1000$ °C.

Remarque 34 *Il est clair que les densités initiales de l'eau (et de la vapeur) vont être différentes pour chaque équation d'état. De même, les pressions initiales de la vapeur données par les différentes équations d'états ne seront pas identiques.*

Comme dans le test présenté à la section 5.2.7, on considère que la bulle de vapeur est initialement de rayon 0.2m et on utilise le maillage présenté dans cette section. On observe, sur la figure 6.11, les pressions et vitesses nodales à 2.10^{-4} secondes. Nous remarquons sur cette figure d'importantes différences. En effet, les vitesses obtenues avec l'utilisation de

Van Der Waals sont jusqu'à six fois plus petites que celles obtenues avec des *stiffened gas*. En fait, on peut voir qu'initialement les vitesses du son données par Van Der Waals sont de 306 m/s pour la vapeur et 688 m/s pour l'eau liquide alors que le *stiffened gas* nous donne lui des vitesses du son de 902 m/s et 1343 m/s. Cette grosse différence explique les différences obtenues dans les résultats finaux.

Le but de cette comparaison est surtout de montrer l'importance du choix de la loi d'état dans la simulation de ce phénomène. En effet, on remarque que ce choix peut amener, sans surprises, à des résultats complètement différents. En fait, pour des applications réelles et industrielles il faudrait utiliser une loi d'état tabulée.

6.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'implémentation du changement de phase dans nos codes de calcul. Prendre en compte ce phénomène a permis d'étudier son impact sur la simulation de l'explosion vapeur, mais aussi de mettre en avant les avantages de l'utilisation d'une approche Lagrangienne.

Nous avons remarqué que le changement de phase décrit dans cette partie n'a pas d'influence sur nos simulations. En effet, la vapeur est initialement située au dessus du point critique et donc, sur les temps de calcul considérés, ce phénomène n'intervient pas. Cependant, un point non traité ici, correspond au choix de l'équation d'état. Il est en effet légitime de s'interroger sur la validité des coefficients des lois d'état utilisées pour les *stiffened gas* dans un domaine thermodynamique situé au dessus du point critique.

Nous avons aussi mis en avant les avantages que présente l'utilisation d'une description Lagrangienne lors de la prise en compte du changement de phase dans des simulations hydrodynamiques. En effet, contrairement à la description Eulérienne, celle-ci permet de ne pas diffuser les interfaces. On a notamment vu l'importance de ce phénomène dans la simulation de compression adiabatique d'une bulle de vapeur.

Conclusion et perspectives

Conclusion

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à la simulation numérique de l'explosion vapeur dans un cadre Lagrangien. Ce phénomène, apparaissant lors de la vaporisation instantanée d'un volume d'eau liquide et entraînant un choc de pression, nous intéresse dans le cadre de la sûreté nucléaire. En effet, comme abordé lors de l'introduction de ce travail, dans le cadre d'un phénomène de fusion du coeur du réacteur, du métal fondu pourrait tomber dans la cuve et entraîner une explosion vapeur. Pour étudier ce phénomène, il est nécessaire de se donner un modèle et des schémas numériques permettant d'approcher les solutions du modèle utilisé.

En premier lieu, nous avons rappelé le modèle utilisé : les équations d'Euler dans un cadre semi-Lagrangien. Cette description a été choisie pour sa simplicité et sa capacité à naturellement conserver les interfaces entre différents fluides. En effet, cela permet de ne pas avoir de zone de mélange à traiter lorsqu'il n'y a pas de changement de phase, contrairement à la description Eulérienne. On élimine alors les risques de perte d'hyperbolicité [Jung 2013] et la nécessité de définir une loi d'état pour le mélange. Cependant, le maillage bouge alors avec le fluide, ce qui entraîne des déformations de celui-ci.

Au second chapitre, nous nous sommes intéressés aux schémas numériques de type Godunov existants pour résoudre ces équations. Dans cette thèse, notre intérêt s'est porté sur les schémas de types volumes finis utilisant des flux nodaux, plutôt que des flux classiquement situés au niveau des arêtes. Nous avons donc rappelé le fonctionnement de deux schémas numériques, GLACE et EUCCLHYD ainsi que leurs principales propriétés. Nous avons notamment rappelé que les solveurs nodaux utilisés dans ces deux schémas sont des généralisations multidimensionnelles du solveur acoustique. Le fonctionnement de ces solveurs nodaux repose principalement sur la résolution de demi-problèmes de Riemann dans la direction de normales nodales pour GLACE, et de normales aux arêtes pour EUCCLHYD. Nous avons rappelé que ces schémas sont conservatifs et vérifient une inégalité entropique. Cependant, nous avons souligné que, les relations permettant d'assurer la conservativité de ces schémas impliquent une dépendance de ces solveurs nodaux à des longueurs caractéristiques des mailles. Le problème qui se pose alors est que dans un simple cas d'un problème

de Riemann unidimensionnel, les vitesses nodales obtenues avec ces solveurs peuvent être erronées.

En utilisant cette dernière remarque, nous avons développé un nouveau solveur nodal dans le troisième chapitre. Les idées principales utilisées dans GLACE et EUCCLHYD ont été réutilisées avec un point de vue continu autour des noeuds. Au lieu de privilégier des directions pour la résolution des demi-problèmes de Riemann, nous avons choisi de résoudre ces demi-problèmes dans toutes les directions. Une relation imposant que la somme des forces autour du noeud soit nulle nous permet de réduire le calcul des vitesses nodales, comme EUCCLHYD et GLACE, à la résolution d'un système linéaire. D'autre part, nous avons fait le choix de ne définir, contrairement aux autres schémas numériques, qu'une unique pression nodale. Finalement, le solveur obtenu ne dépend que de la répartition angulaire des variables physiques autour du noeud et non de longueurs caractéristiques des mailles voisines. Il en ressort alors que, lorsque le maillage est aligné avec le choc, notre solveur nodal donnera toujours une vitesse ayant la bonne direction. De plus, nous avons montré que le schéma obtenu vérifie une propriété de consistance faible, comme GLACE. Nous avons, dans la preuve de la consistance faible, fait ressortir la dépendance de l'erreur de consistance à l'impédance, et souligné que cette erreur étant multipliée par l'impédance acoustique, cela pouvait induire des problèmes. Aussi, remarquant que l'inégalité entropique n'est pas vérifiée avec notre schéma, nous avons montré comment il est possible de construire des schémas hybrides, sur l'idée de θ -schémas, avec EUCCLHYD ou GLACE, imposant une inégalité entropique.

Finalement, remarquant que la relation du solveur nodal imposant que la somme des forces autour du noeud soit nulle, ne correspond pas au principe fondamentale de la dynamique, nous avons proposé une modification du solveur nodal prenant en compte ce principe physique.

Les résultats numériques présentés au quatrième chapitre nous ont permis de mettre en avant les qualités et défauts du schéma numérique développé durant cette thèse. Nous avons notamment mis en avant le fait que notre approche continue permet de réduire les erreurs de symétrie. En particulier, ces erreurs sont réduites de manière importante au niveau des interfaces. Cependant, nous avons pu voir que les cas tests de Saltzman et

Sedov posent des problèmes à notre schéma. Nous avons montré que ces problèmes ne sont pas liés à l'inégalité entropique mais plutôt à la faible dissipation du schéma. Sur ces cas extrêmes, cela constitue un désavantage. Mais nous avons aussi montré, grâce aux cas tests de Richtmyer-Meshkov ou du vortex, que la faible dissipation de notre schéma pouvait aussi être un avantage. Finalement, nous avons montré que notre schéma numérique permet de faire des simulations d'explosion vapeur, et dans ce cadre d'application notre schéma se comporte bien.

Finalement, dans le dernier chapitre, nous avons fait une étude thermodynamique du problème. Nous nous sommes penchés sur le problème des changements de phase liquide-vapeur. Dans ce cadre, l'approche Lagrangienne ayant l'avantage de ne pas diffuser les interfaces, permet d'obtenir de meilleurs résultats qu'une approche Eulérienne sur certains cas. Nous avons aussi montré que ce phénomène n'intervient pas dans l'explosion vapeur étant donné que la vapeur est située au-dessus du point critique. Cela pose d'ailleurs un problème lors de l'utilisation de lois d'état de type *stiffened gas*, qui ne permettent pas de définir de point critique.

Perspectives

Pour le schéma numérique

Dissipation : De notre point de vue, le premier problème à traiter pour améliorer le schéma numérique développé dans cette thèse, est celui de la dissipation. En effet, même si la faible dissipation peut être un avantage, elle peut aussi se transformer en un désavantage sur certains cas. L'idée serait alors d'essayer de mieux contrôler cette dissipation et d'en rajouter pour améliorer les résultats obtenus sur les cas tests de Saltzman et Sedov. Notre idée, pour régler ce problème, serait de s'inspirer de ce qui se fait pour les schémas décalés dans le cadre de l'introduction de viscosité artificielle en s'inspirant des travaux de Caramana et Shashkov [1998]; Caramana et al. [1998a]. Nous pensons aussi que cela permettrait, par la même occasion, d'obtenir l'inégalité entropique.

Prise en compte d'autres forces : Un autre point intéressant à développer serait la prise en compte des forces négligées dans le cadre de cette thèse, en particulier la gravité. Nous pensons que la formulation du solveur nodal prenant en compte le principe fondamental de la dynamique pourrait permettre de construire un solveur nodal hydrostatique de la même manière que ce qui a été fait pour GLACE par Despres [2010].

Dimension trois : Une extension en dimension trois permettrait de poursuivre le travail engagé ici. Une première approche en est proposée dans les annexes mais mériterait d'être approfondie. De notre point de vue, une difficulté qui se présentera sera le calcul des sous domaines $\mathcal{I} \subset [0, \pi] \times [0, 2\pi]$ correspondant à chaque cellule autour des noeuds. En effet, en dimension deux, ce sous domaine est un intervalle très simple à déterminer en utilisant par exemple des fonctions arctan. De plus, en dimension trois, l'utilisation de formules d'intégration numérique pourrait être nécessaire.

Application à l'explosion vapeur

Dans le cadre de l'application à l'explosion vapeur, la principale amélioration qui peut être portée à ce qui est présenté dans cette thèse, est l'utilisation de lois d'états différentes. La première possibilité serait d'utiliser une loi d'état tabulée décrivant bien les états critiques qui entrent dans la simulation de ce phénomène.

Une deuxième possibilité, serait d'utiliser la formulation *IAPWS* développée par Wagner et Pruß [2002] qui est une bonne approximation du comportement réel de l'eau dans les zones qui nous intéressent.

Bibliographie

- F.L. Addessio, D.E. Carroll, J.K. Dukowicz, F.H. Harlow, J.N. Johnson, B.A. Kashiwa, M.E. Maltrud, et H.M. Ruppel. Caveat : a computer code for fluid dynamics problems with large distortion and internal slip. Technical report, Los Alamos National Lab., NM (USA), 1986. (Cité à la page 50.)
- A.J. Barlow, P-H. Maire, W.J. Rider, R.N. Rieben, et M.J. Shashkov. Arbitrary lagrangian-eulerian methods for modeling high-speed compressible multimaterial flows. *Journal of Computational Physics*, 322 :603–665, 2016. (Cité à la page 50.)
- T. Barth et D. Jespersen. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. In *27th Aerospace sciences meeting*, page 366, 1989. (Cité aux pages 101 et 103.)
- D.J. Benson. Computational methods in lagrangian and eulerian hydrocodes. *Computer methods in Applied mechanics and Engineering*, 99(2) :235–394, 1992. (Cité à la page 49.)
- C. Brayer et G. Berthoud. First vapor explosion calculations performed with MC3D thermal-hydraulic code. Technical report, CEA (France), 1998. (Cité à la page 28.)
- D.E. Burton, T.C. Carney, N.R. Morgan, S.K. Sambasivan, et M.J. Shashkov. A cell-centered lagrangian godunov-like method for solid dynamics. *Computers & Fluids*, 83 : 33–47, 2013. (Cité à la page 50.)
- D.E. Burton, N.R. Morgan, T.C. Carney, et M.A. Kenamond. Reduction of dissipation in lagrange cell-centered hydrodynamics (cch) through corner gradient reconstruction (cgr). *Journal of Computational Physics*, 299 :229–280, 2015. (Cité à la page 50.)
- H.B. Callen. Thermodynamics and an introduction to thermostatistics, 1998. (Cité aux pages 44, 46, 157 et 158.)

BIBLIOGRAPHIE

- J.C. Campbell et M.J. Shashkov. A tensor artificial viscosity using a mimetic finite difference algorithm. *Journal of Computational Physics*, 172(2) :739–765, 2001. (Cité à la page 92.)
- E.J. Caramana et M.J. Shashkov. Elimination of artificial grid distortion and hourglass-type motions by means of lagrangian subzonal masses and pressures. *Journal of Computational Physics*, 142(2) :521–561, 1998. (Cité aux pages 181 et 204.)
- E.J. Caramana, D.E. Burton, M.J. Shashkov, et P.P. Whalen. The construction of compatible hydrodynamics algorithms utilizing conservation of total energy. *Journal of Computational Physics*, 146(1) :227–262, 1998a. (Cité aux pages 52 et 181.)
- E.J. Caramana, M.J. Shashkov, et P.P. Whalen. Formulations of artificial viscosity for multi-dimensional shock wave computations. *Journal of Computational Physics*, 144(1) :70–97, 1998b. (Cité aux pages 49 et 92.)
- G. Carré, S. Del Pino, B. Després, et E. Labourasse. A cell-centered lagrangian hydrodynamics scheme on general unstructured meshes in arbitrary dimension. *Journal of Computational Physics*, 228(14) :5160–5183, 2009. (Cité aux pages 50, 51, 55 et 136.)
- C. Chalons, M. Girardin, et S. Kokh. An all-regime lagrange-projection like scheme for the gas dynamics equations on unstructured meshes. *Communications in Computational Physics*, 20(01) :188–233, 2016. (Cité à la page 137.)
- J. Cheng et C-W. Shu. Improvement on spherical symmetry in two-dimensional cylindrical coordinates for a class of control volume lagrangian schemes. *Communications in Computational Physics*, 11(4) :1144, 2012. (Cité à la page 50.)
- J. Cheng et C-W. Shu. Positivity-preserving lagrangian scheme for multi-material compressible flow. *Journal of Computational Physics*, 257 :143–168, 2014a. (Cité à la page 101.)
- J. Cheng et C-W. Shu. Second order symmetry-preserving conservative lagrangian scheme for compressible euler equations in two-dimensional cylindrical coordinates. *Journal of Computational Physics*, 272 :245–265, 2014b. (Cité aux pages 50 et 101.)

BIBLIOGRAPHIE

- P. Colella et K. Pao. A projection method for low speed flows. *Journal of Computational Physics*, 149(2) :245–269, 1999. (Cité à la page 137.)
- S. Dellacherie, J. Jung, P. Omnes, et P-A. Raviart. Construction of modified godunov-type schemes accurate at any mach number for the compressible euler system. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 26(13) :2525–2615, 2016. (Cité à la page 137.)
- B. Despres. *Lois de conservations Eulériennes, Lagrangiennes et méthodes numériques*. Springer, 2010. (Cité aux pages 29, 31 et 182.)
- B. Després. Weak consistency of the cell-centered lagrangian glace scheme on general meshes in any dimension. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(41) :2669–2679, 2010. (Cité aux pages 29, 60, 83, 84 et 91.)
- B. Després et C. Mazeran. Lagrangian gas dynamics in two dimensions and lagrangian systems. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 178(3) :327–372, 2005. (Cité aux pages 28, 29, 50, 51 et 55.)
- V.A. Dobrev, T.E. Ellis, T.V. Kolev, et R.N. Rieben. Curvilinear finite elements for lagrangian hydrodynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 65(11-12) : 1295–1310, 2011. (Cité à la page 49.)
- V.A. Dobrev, T.V. Kolev, et R.N. Rieben. High-order curvilinear finite element methods for lagrangian hydrodynamics. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 34(5) :B606–B641, 2012. (Cité à la page 49.)
- F. Dubois. 3.1 partial riemann problem, boundary conditions, and gas dynamics. *Absorbing Boundaries and Layers, Domain Decomposition Methods : Applications to Large Scale Computers*, 16, 2001. (Cité à la page 42.)
- J.K. Dukowicz. A general, non-iterative riemann solver for godunov’s method. *Journal of Computational Physics*, 61(1) :119–137, 1985. (Cité à la page 66.)
- J.K. Dukowicz et B.J.A. Meltz. Vorticity errors in multidimensional lagrangian codes. *Journal of Computational Physics*, 99(1) :115–134, 1992. (Cité à la page 117.)

- G. Faccanoni. *Étude d'un modèle fin de changement de phase liquide-vapeur*. PhD thesis, École Polytechnique, 2009. (Cité aux pages 47, 155, 157, 158, 160, 164, 170 et 171.)
- G. Faccanoni, S. Kokh, et G. Allaire. Modelling and simulation of liquid-vapor phase transition in compressible flows based on thermodynamical equilibrium. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 46(5) :1029–1054, 2012. (Cité aux pages 157, 164 et 170.)
- E. Godlewski et P-A. Raviart. *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*, volume 118. Springer Science & Business Media, 2013. (Cité aux pages 50 et 106.)
- S. Godunov, A.V. Zabrodin, M. Ivanov, A.N. Kraiko, et G.P. Prokopov. Numerical solution of multidimensional problems of gas dynamics. *Moscow Izdatel Nauka*, 1, 1976. (Cité aux pages 55 et 78.)
- S. De Groot et P. Mazur. *Non-equilibrium thermodynamics*. Courier Corporation, 2013. (Cité à la page 44.)
- P. Helluy. *Quelques exemples de méthodes numériques récentes pour le calcul des écoulements multiphasiques*. PhD thesis, 2004. (Cité à la page 155.)
- S. Jaouen. *Etude mathématique et numérique de stabilité pour des modèles hydrodynamiques avec transition de phase*. PhD thesis, 2001. (Cité aux pages 155, 163 et 166.)
- J. Jung. *Schémas numériques adaptés aux accélérateurs multicoeurs pour les écoulements bifluïdes*. PhD thesis, Strasbourg, 2013. (Cité aux pages 43 et 179.)
- J.R. Kamm et F.X. Timmes. On efficient generation of numerically robust sedov solutions. Technical report, Technical Report LA-UR-07-2849, Los Alamos National Laboratory, 2007. (Cité aux pages 123 et 124.)
- R.E. Kidder. Laser-driven compression of hollow shells : power requirements and stability limitations. *Nuclear Fusion*, 16(1) :3, 1976. (Cité à la page 131.)
- L.D. Landau et E.M. Lifshitz. *Fluid mechanics : Landau and Lifshitz : course of theoretical physics*, volume 6. Elsevier, 2013. (Cité aux pages 116, 156 et 162.)

BIBLIOGRAPHIE

- R.J. LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*, volume 132. Springer, 1992. (Cité à la page 60.)
- R. Loubère, P-H. Maire, et B. Rebourec. Staggered and colocated finite volume schemes for lagrangian hydrodynamics. *Handbook of Numerical Analysis*, 17 :319–352, 2016. (Cité à la page 49.)
- H. Lund et T. Flåtten. Equilibrium conditions and sound velocities in two-phase flows. In *SIAM Annual Meeting, Pittsburg, Pennsylvania, USA*, 2010. (Cité à la page 164.)
- P-H. Maire. A high-order cell-centered lagrangian scheme for two-dimensional compressible fluid flows on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 228(7) :2391–2425, 2009. (Cité aux pages 50, 64, 66, 67, 69, 94, 117, 123 et 139.)
- P-H. Maire. *Contribution to the numerical modeling of inertial confinement fusion*. PhD thesis, Université Bordeaux I, 2011. (Cité aux pages 29, 31, 39, 40, 43, 193 et 204.)
- P-H. Maire et B. Nkonga. Multi-scale godunov-type method for cell-centered discrete lagrangian hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 228(3) :799–821, 2009. (Cité aux pages 64, 100 et 103.)
- P-H. Maire, R. Abgrall, J. Breil, et J. Ovadia. A cell-centered lagrangian scheme for two-dimensional compressible flow problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 29(4) : 1781–1824, 2007. (Cité aux pages 28, 29, 50, 63, 64, 65 et 66.)
- P-H. Maire, M. De Buhan, A. Diaz, C. Dobrzynski, G. Kluth, et F. Lagoutière. A cell-centered arbitrary lagrangian eulerian (ale) method for multi-material compressible flows. In *ESAIM : proceedings*, volume 24, pages 1–13. EDP Sciences, 2008. (Cité à la page 50.)
- O. Le Métayer, J. Massoni, et R. Saurel. Elaborating equations of state of a liquid and its vapor for two-phase flow models. *International Journal of Thermal Sciences*, 2004a. (Cité à la page 142.)
- O. Le Métayer, J. Massoni, et R. Saurel. Élaboration des lois d’état d’un liquide et de sa vapeur pour les modèles d’écoulements diphasiques. *International journal of thermal sciences*, 43(3) :265–276, 2004b. (Cité à la page 46.)

BIBLIOGRAPHIE

- D-Y. Peng et D.B. Robinson. A new two-constant equation of state. *Ind. Eng. Chem. Fundam*, 15(1) :59–64, 1976. (Cit     la page 156.)
- R.D. Richtmyer. Taylor instability in shock acceleration of compressible fluids. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 13(2) :297–319, 1960. (Cit     la page 138.)
- R. Sairanen, G. Berthoud, G. Ratel, R. Meignen, H. Jacobs, M. Buerger, M. Buck, M. Moriyama, M. Naito, J.H. Song, et al. Oecd research programme on fuel-coolant interaction steam explosion resolution for nuclear applications-serena. final report-december 2006. Technical report, Organisation for Economic Co-Operation and Development, 2007. (Cit     la page 27.)
- R. Saurel, F. Petitpas, et R. Abgrall. Modelling phase transition in metastable liquids : application to cavitating and flashing flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 607 :313–350, 2008. (Cit   aux pages 142, 167 et 174.)
- G. Scovazzi, E. Love, et M.J. Shashkov. Multi-scale lagrangian shock hydrodynamics on q1/p0 finite elements : Theoretical framework and two-dimensional computations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 197(9) :1056–1079, 2008. (Cit     la page 49.)
- J. Serrin. Mathematical principles of classical fluid mechanics. In *Fluid Dynamics I/Str omungsmechanik I*, pages 125–263. Springer, 1959. (Cit   aux pages 29 et 31.)
- G.A. Sod. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics*, 27(1) :1–31, 1978. (Cit     la page 105.)
- R. Temam et A. Miranville. *Mathematical modeling in continuum mechanics*. Cambridge University Press, 2005. (Cit   aux pages 29 et 31.)
- E.F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics : a practical introduction*. Springer Science & Business Media, 2013. (Cit   aux pages 50 et 106.)
- V. Venkatakrisnan. Convergence to steady state solutions of the euler equations on un-

- structured grids with limiters. *Journal of computational physics*, 118(1) :120–130, 1995. (Cité à la page 102.)
- F. Vilar, C-W. Shu, et P-H. Maire. Positivity-preserving cell-centered lagrangian schemes for multi-material compressible flows : From first-order to high-orders. part i : The one-dimensional case. *Journal of Computational Physics*, 312 :385–415, 2016a. (Cité aux pages 69 et 113.)
- F. Vilar, C-W. Shu, et P-H. Maire. Positivity-preserving cell-centered lagrangian schemes for multi-material compressible flows : From first-order to high-orders. part ii : The two-dimensional case. *Journal of Computational Physics*, 312 :416–442, 2016b. (Cité à la page 69.)
- J. VonNeumann et R.D. Richtmyer. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *Journal of applied physics*, 21(3) :232–237, 1950. (Cité aux pages 49 et 92.)
- A. Voß et J. Ballmann. *Exact Riemann solution for the Euler equations with nonconvex and nonsmooth equation of state*. PhD thesis, PhD thesis, RWTH Aachen, 2005. (Cité aux pages 155, 156 et 166.)
- W. Wagner et A. Pruß. The iapws formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use. *Journal of physical and chemical reference data*, 31(2) :387–535, 2002. (Cité à la page 182.)
- P.P. Whalen. Algebraic limitations on two-dimensional hydrodynamics simulations. *Journal of Computational Physics*, 124(1) :46–54, 1996. (Cité à la page 52.)
- M.L. Wilkins. Use of artificial viscosity in multidimensional shock wave problems. *J. Comput. Phys*, 36 :281–303, 1980. (Cité à la page 49.)
- A.D. Wood. A textbook of sound. 1930. *G. Bell and Sons Ltd., London*, 1930. (Cité à la page 159.)
- Y. Yang, Q. Zhang, et D.H. Sharp. Small amplitude theory of richtmyer–meshkov instability. *Physics of Fluids (1994-present)*, 6(5) :1856–1873, 1994. (Cité à la page 138.)

M. Zabiego, C. Brayer, D. Grishchenko, J-B. Dajon, P. Fouquart, Y. Bullado, F. Compagnon, P. Correggio, J-F. Haquet, et P. Piluso. The krotos kfc and serena/ks1 tests : experimental results and mc3d calculations. In *7th International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2010, Tampa, FL USA, May 30-June 4, 2010*, 2010. (Cité à la page 28.)

Annexes

Annexe A

Annexe

A.1 Tenseurs de second ordre

A.1.1 Définitions

Définition 7 Soient \mathbf{u} et \mathbf{v} deux vecteurs de \mathbb{R}^d . Le produit tensoriel $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}$ (aussi appelé produit dyadique) de \mathbf{u} et \mathbf{v} est défini tel que

$$\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \quad (\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) \mathbf{x} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{u}. \quad (\text{A.1})$$

Remarque 35 Cette relation définit une application linéaire définie par la matrice qu'on note aussi $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}$ avec

$$(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v})_{i,j} = u_i v_j \quad (\text{A.2})$$

où les composantes du vecteur \mathbf{u} (resp \mathbf{v}) sont notées u_i (resp v_i) pour $1 \leq i \leq d$.

A.1.2 Identités tensorielles

Nous rappelons ici quelques identités tensorielles. Pour des précisions et des preuves concernant les résultats suivant nous invitons le lecteur intéressé à regarder l'annexe de l'habilitation à diriger des recherches de Maire [2011] et les références qui y sont incluses.

Considérons \mathbf{u} et \mathbf{v} des vecteurs et T un tenseur. On a alors les égalités suivantes

$$\nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) = (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{v} + \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (\text{A.3})$$

$$\nabla \cdot (pT) = p \nabla \cdot T + T \nabla p \quad (\text{A.4})$$

Considérons maintenant S, L, T des tenseurs du second ordre et notons I l'identité. On a les égalités

$$S : I = \text{tr}(S), \quad (\text{A.5})$$

$$L : (ST) = (S^t L) : T = (LT^t) : S. \quad (\text{A.6})$$

A.2 Transformation d'intégrales

A.2.1 Théorème de la divergence

Rappelons dans un premier temps la formule de Green, aussi appelée théorème de la divergence. Soit ω un sous domaine de \mathbb{R}^d où $d \in \mathbb{N}$. Considérons un vecteur \mathbf{u} et T un tenseur d'ordre 2 de \mathbb{R}^d . Supposons dans un premier temps que \mathbf{u} et T soient de classe \mathcal{C}^1 . On a alors les deux égalités suivantes

$$\int_{\omega} \nabla \cdot \mathbf{u} dv = \int_{\partial\omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds \quad (\text{A.7})$$

$$\int_{\omega} \nabla \cdot T dv = \int_{\partial\omega} T \mathbf{n} ds. \quad (\text{A.8})$$

On rappelle aussi le résultat équivalent sur le gradient obtenu par calcul direct. Considérons f une fonction scalaire de classe \mathcal{C}^1 . On a alors

$$\int_{\omega} \nabla f dv = \int_{\partial\omega} f \mathbf{n} ds \quad (\text{A.9})$$

$$\int_{\omega} \nabla \mathbf{u} dv = \int_{\partial\omega} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} ds, \quad (\text{A.10})$$

où on définit de manière classique $\nabla \mathbf{u} = (\nabla \mathbf{u}_{i,j})$ et $\nabla \mathbf{u}_{i,j} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ avec $\mathbf{u} = (u_i)_{i=1}^d$.

A.2.2 Formule de transport généralisée

Dans le premier chapitre on a démontré la formule de transport de Reynolds (2.16) qui est vraie pour les sous-domaine ω bougeant avec le fluide. Considérons ici que le mouvement soit arbitraire, et donc différent de celui du fluide. Ce mouvement peut être décrit par une application différentiable

$$\chi : \begin{array}{l} \Omega_{\xi} \rightarrow \omega \\ \xi \rightarrow \chi(\xi, t) \end{array}. \quad (\text{A.11})$$

On fait de plus l'hypothèse que $\chi(\boldsymbol{\xi}, t = 0) = \boldsymbol{\xi}$. On note \mathbf{v} le champ de vitesse associé à cette application

$$\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} \chi(\boldsymbol{\xi}, t). \quad (\text{A.12})$$

Soit f une fonction scalaire régulière. On peut écrire f dans les coordonnées Eulériennes \mathbf{x} où dans les coordonnées de la configuration initiale $\boldsymbol{\xi}$

$$f(\mathbf{x}, t) = f(\chi(\boldsymbol{\xi}, t), t). \quad (\text{A.13})$$

De la même manière que ce qui a été fait avec les coordonnées Lagrangienne, on peut définir la dérivée temporelle qui suit la particule initialement en $\boldsymbol{\xi}$

$$\left. \frac{df}{dt} \right|_{\boldsymbol{\xi}} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f. \quad (\text{A.14})$$

On peut alors faire le lien entre cette dérivée temporelle et la dérivée matérielle

$$\left. \frac{df}{dt} \right|_{\boldsymbol{\xi}} = \frac{df}{dt} + (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f \quad (\text{A.15})$$

où \mathbf{u} est la vitesse du fluide considéré. On peut de la même manière à ce qui a été fait pour l'application ψ liant coordonnées Eulériennes et Lagrangiennes, définir plusieurs éléments liés à l'application χ . Tout d'abord notons $J_{\boldsymbol{\xi}} = \det(\nabla_{\boldsymbol{\xi}} \chi)$. Des hypothèses similaires à celles faites dans la section 2.1.2 nous donne que $J_{\boldsymbol{\xi}} > 0$ et $dv = J_{\boldsymbol{\xi}} dV_{\boldsymbol{\xi}}$. De plus, on peut montrer que

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{\boldsymbol{\xi}} J_{\boldsymbol{\xi}} = J_{\boldsymbol{\xi}} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{A.16})$$

En utilisant cette relation dans (A.14) on obtient

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{\boldsymbol{\xi}} (f J_{\boldsymbol{\xi}}) = J_{\boldsymbol{\xi}} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f \mathbf{v}) \right). \quad (\text{A.17})$$

On peut donc calculer

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} \right|_{\boldsymbol{\xi}} \int_{\omega} f(\mathbf{x}, t) dv &= \int_{\Omega_{\boldsymbol{\xi}}} \left. \frac{d}{dt} \right|_{\boldsymbol{\xi}} [f(\chi(\boldsymbol{\xi}, t), t) J_{\boldsymbol{\xi}}] dV_{\boldsymbol{\xi}} \\ &= \int_{\Omega_{\boldsymbol{\xi}}} J_{\boldsymbol{\xi}} \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f \mathbf{v}) \right] dV_{\boldsymbol{\xi}}. \end{aligned}$$

D'où

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{\boldsymbol{\xi}} \int_{\omega} f(\mathbf{x}, t) dv = \int_{\omega} \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f \mathbf{v}) \right] dv. \quad (\text{A.18})$$

En appliquant un théorème de divergence on obtient

$$\frac{d}{dt} \Big|_{\xi} \int_{\omega} f(\mathbf{x}, t) dv = \int_{\omega} \frac{\partial f}{\partial t} dv + \int \partial\omega f \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} ds. \quad (\text{A.19})$$

Finalement en utilisant la formule de Reynolds (2.16) on a

$$\frac{d}{dt} \Big|_{\xi} \int_{\omega} f(\mathbf{x}, t) dv = \frac{d}{dt} \int_{\omega} f(\mathbf{x}, t) dv - \int_{\partial\omega} f(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} ds. \quad (\text{A.20})$$

Annexe B

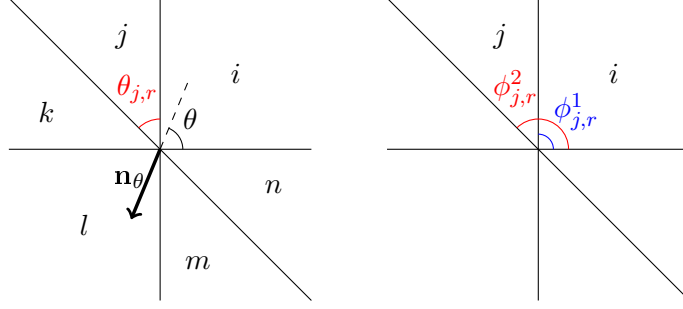
Annexe

B.1 Calculs liés au solveur nodal

Dans cette partie nous précisons les calculs nécessaires à l'utilisation du solveur nodal (4.5) présenté au troisième chapitre. On rappelle que le solveur nodal peut être écrit sous la forme

$$\begin{aligned} A_r \mathbf{u}_r &= \mathbf{B}_r, \\ \Gamma_r p_r &= \sum_{j \sim r} \Gamma_{j,r} p_j + \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}_{j,r}, \\ A_r &= \sum_{j \sim r} A_{j,r}, \\ \mathbf{B}_r &= \sum_{j \sim r} [A_{j,r} \mathbf{u}_j + p_j \mathbf{n}_{j,r}], \\ A_{j,r} &= \alpha_j \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \mathbf{n}_\theta \otimes \mathbf{n}_\theta d\theta, \\ \mathbf{n}_{j,r} &= \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \mathbf{n}_\theta d\theta, \\ \Gamma_r &= \sum_{j \sim r} \Gamma_{j,r}, \\ \Gamma_{j,r} &= \frac{\theta_{j,r}}{\alpha_j}. \end{aligned} \tag{B.1}$$

où les $\theta_{j,r}$ sont les ouvertures angulaires et les $\phi_{j,r}^{1,2}$ sont les angles définis par les arêtes de la cellule j adjacentes au noeud r (voir figure B.1).


 FIGURE B.1 – Répartition angulaire autour du noeud r .

Proposition 20 *Considérons les matrices $A_{j,r}$ et les vecteur $\mathbf{n}_{j,r}$ définis par les relations (B.1). Alors*

$$A_{j,r} = \frac{\alpha_j}{4} \begin{pmatrix} 2\theta_{j,r} + \sin(2\phi_{j,r}^2) - \sin(2\phi_{j,r}^1) & \cos(2\phi_{j,r}^1) - \cos(2\phi_{j,r}^2) \\ \cos(2\phi_{j,r}^1) - \cos(2\phi_{j,r}^2) & 2\theta_{j,r} + \sin(2\phi_{j,r}^1) - \sin(2\phi_{j,r}^2) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{n}_{j,r} = \begin{pmatrix} \sin(\phi_{j,r}^1) - \sin(\phi_{j,r}^2) \\ \cos(\phi_{j,r}^2) - \cos(\phi_{j,r}^1) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Démonstration. Rappelons que $\mathbf{n}_\theta = -\begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix}$. Le résultat sur $\mathbf{n}_{j,r}$ est obtenu par un calcul direct. Concentrons maintenant nos efforts sur le calcul de $A_{j,r}$. Pour cela nous allons calculer $\int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \mathbf{n}_\theta \otimes \mathbf{n}_\theta d\theta$. On rappelle que

$$\mathbf{n}_\theta \otimes \mathbf{n}_\theta = \begin{pmatrix} \cos^2(\theta) & \cos(\theta)\sin(\theta) \\ \cos(\theta)\sin(\theta) & \sin^2(\theta) \end{pmatrix}$$

Or $\cos^2(\theta) = \frac{1+\cos(2\theta)}{2}$. Donc

$$\begin{aligned} \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \cos^2(\theta) d\theta &= \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \frac{1+\cos(2\theta)}{2} d\theta, \\ &= \frac{\theta_{j,r}}{2} + \frac{1}{4} [\sin(2\theta)]_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2}, \\ &= \frac{1}{4} \left[2\theta_{j,r} + \sin(2\phi_{j,r}^2) - \sin(2\phi_{j,r}^1) \right]. \end{aligned}$$

Ce qui donne le premier coefficient de la matrice $A_{j,r}$. D'autre part, en rappelant que $\sin^2(\theta) = 1 - \cos^2(\theta)$ on obtient

$$\begin{aligned} \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \sin^2(\theta) d\theta &= \theta_{j,r} - \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \cos^2(\theta) d\theta, \\ &= \frac{1}{4} \left[2\theta_{j,r} + \sin(2\phi_{j,r}^1) - \sin(2\phi_{j,r}^2) \right]. \end{aligned}$$

Ce qui donne le deuxième terme diagonal de $A_{j,r}$. Rappelons maintenant que $\cos(\theta) \sin(\theta) = \frac{\sin(2\theta)}{2}$. On a alors

$$\begin{aligned} \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \cos(\theta) \sin(\theta) d\theta &= \frac{1}{2} \int_{\phi_{j,r}^1}^{\phi_{j,r}^2} \sin(2\theta) d\theta, \\ &= \frac{1}{4} \left[\cos\left(2\phi_{j,r}^1\right) - \cos\left(2\phi_{j,r}^2\right) \right]. \end{aligned}$$

Ce qui conclut la preuve. □

Remarque 36 *En remarquant que*

$$\begin{aligned} \sin(x) - \sin(y) &= 2 \sin\left(\frac{x-y}{2}\right) \cos\left(\frac{x+y}{2}\right), \\ \cos(x) - \cos(y) &= -2 \sin\left(\frac{x-y}{2}\right) \cos\left(\frac{x+y}{2}\right), \end{aligned}$$

on peut réécrire $A_{j,r}$ sous la forme

$$A_{j,r} = \frac{\alpha_j}{2} \left[\theta_{j,r} I + \sin(\theta_{j,r}) \begin{pmatrix} \cos(\Phi_{j,r}) & \sin(\Phi_{j,r}) \\ \sin(\Phi_{j,r}) & -\cos(\Phi_{j,r}) \end{pmatrix} \right], \quad (\text{B.3})$$

où I est la matrice identité de dimension deux.

Proposition 21 *Soit $A_{j,r}$ une matrice définie par les relations (B.1). Alors $A_{j,r}$ est une matrice symétrique définie positive.*

Démonstration. Il est clair, que les résultats présentés à la proposition 20 implique que $A_{j,r}$ soit symétrique. Nous allons maintenant déterminer ses valeurs propres pour montrer que cette matrice est bien définie positive. Pour cela il suffit de montrer que $\frac{4}{\alpha_j} A_{j,r}$ est définie positive car $\alpha_j > 0$. Déterminons les valeurs propres de cette dernière matrice. Pour simplifier les calculs, nous noterons dans cette preuve $\phi_{j,r}^1 = \phi_1$, $\phi_{j,r}^2 = \phi_2$ et $\theta_{j,r} = \theta$.

$$\begin{aligned} \det\left(\frac{4}{\alpha_j} A_{j,r} - \lambda I\right) &= (2\theta + \sin(2\phi_2) - \sin(2\phi_1))(2\theta - (\sin(2\phi_2) - \sin(2\phi_1))) + \\ &\quad - (\cos(2\phi_1) - \cos(2\phi_2))^2, \\ &= (2\theta - \lambda)^2 - (\sin(2\phi_2) - \sin(2\phi_1))^2 - (\cos(2\phi_1) - \cos(2\phi_2))^2, \\ &= (2\theta - \lambda)^2 - 2 + 2(\sin(2\phi_1) \sin(2\phi_2) + \cos(2\phi_1) \cos(2\phi_2)), \\ &= (2\theta - \lambda)^2 - 2(1 - \cos(2(\phi_2 - \phi_1))), \\ &= \left(2\theta + \sqrt{2(1 - \cos(2(\phi_2 - \phi_1)))} - \lambda\right) \left(2\theta - \sqrt{2(1 - \cos(2(\phi_2 - \phi_1)))} - \lambda\right). \end{aligned}$$

Les valeurs propres recherchées sont donc

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= 2\theta \pm \sqrt{2(1 - \cos(2(\phi_2 - \phi_1)))} \\ &= 2(\theta \pm |\sin(\theta)|). \end{aligned}$$

Finalement, remarquons que θ étant une ouverture angulaire, on a $\theta \in]0, 2\pi]$. Or il est connu que

$$\forall \theta \in]0, 2\pi], \theta \pm |\sin(\theta)| > 0.$$

Donc, $A_{j,r}$ admet deux valeurs propres strictement positives. □

B.2 Calcul de la pression et erreur de consistance

B.2.1 Calcul de la pression

Nous nous intéressons ici au calcul de la pression, et notamment à l'influence des erreurs de consistance et de l'impédance acoustique sur cette variable. Supposons dans cette sous-section que la loi de pression utilisée est de type *stiffened gas* de la forme

$$p(\rho, e) = (\gamma - 1)\rho e - \gamma\pi. \tag{B.4}$$

On a alors

$$\begin{aligned} \frac{\tau p}{\gamma - 1} &= e - \frac{\tau\gamma}{\gamma - 1}\pi, \\ &= E - \frac{|w|^2}{2} - \frac{\tau\gamma}{\gamma - 1}\pi. \end{aligned}$$

D'autre part, en utilisant (4.13) on a

$$\begin{aligned} \left| \mathbf{u}_j^{n+1} \right|^2 &= \left| \mathbf{u}_j^n - \frac{\delta t}{M_j} \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} p_r \right|^2, \\ &= \left| \mathbf{u}_j^n \right|^2 - 2 \frac{\delta t}{M_j} \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_j^n + \frac{\delta t^2}{M_j^2} \left| \sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \right|^2. \end{aligned}$$

D'où, en utilisant (4.13) et (3.34) on peut écrire

$$\begin{aligned}
 \frac{\tau_j^{n+1} p_j^{n+1}}{\gamma-1} &= \frac{\tau_j^n p_j^n}{\gamma-1} + \frac{\delta t}{M_j} \left[\sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} (\mathbf{u}_j^n - \mathbf{u}_r) - \frac{\gamma}{\gamma-1} \pi \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \right] - \\
 &\quad - \frac{1}{2} \frac{\delta t^2}{M_j^2} \left[\left| \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} p_r \right|^2 + M_j \frac{\gamma \pi}{\gamma-1} \sum_{r \sim j} \mathbf{u}_r^\perp \cdot \mathbf{u}_{r+} \right], \\
 &= \frac{\tau_j^{n+1} p_j^n}{\gamma-1} + \frac{\delta t}{M_j} \left[\sum_{r \sim j} p_r \mathbf{C}_{j,r} \cdot (\mathbf{u}_j^n - \mathbf{u}_r) - (p_j^n + \gamma \pi) \frac{1}{\gamma-1} \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \right] - \\
 &\quad - \frac{1}{2} \frac{\delta t^2}{M_j^2} \left[\left| \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} p_r \right|^2 + (\gamma \pi + p_j^n) \frac{M_j}{\gamma-1} \sum_{r \sim j} \mathbf{u}_r^\perp \cdot \mathbf{u}_{r+} \right] \\
 &= \frac{\tau_j^{n+1} p_j^n}{\gamma-1} - \frac{\tau_j^{n+1}}{\gamma-1} (\alpha_j^n)^2 \frac{\delta t}{M_j} \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r + \\
 &\quad + \frac{\delta t}{M_j} \left[\sum_{r \sim j} (p_r - p_j^n) \mathbf{C}_{j,r} \cdot (\mathbf{u}_j^n - \mathbf{u}_r) - \frac{\gamma}{\gamma-1} (p_j^n + \pi) \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r + \frac{\tau_j^{n+1} (\alpha_j^n)^2}{\gamma-1} \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \right] \\
 &\quad - \frac{\delta t^2}{2M_j^2} \left[\left| \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} p_r \right|^2 + (\gamma \pi + p_j^n) \frac{M_j}{\gamma-1} \sum_{r \sim j} \mathbf{u}_r^\perp \cdot \mathbf{u}_{r+} \right], \\
 &= \frac{\tau_j^{n+1} p_j^n}{\gamma-1} - \frac{\tau_j^{n+1}}{\gamma-1} (\alpha_j^n)^2 \frac{\delta t}{M_j} \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r + \frac{\delta t}{M_j} \sum_{r \sim j} (p_r - p_j^n) \mathbf{C}_{j,r} \cdot (\mathbf{u}_j^n - \mathbf{u}_r) - \\
 &\quad - \frac{1}{2} \frac{\delta t^2}{M_j^2} \left[\left| \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} p_r \right|^2 + (\gamma \pi + p_j^n) \frac{M_j}{\gamma-1} \sum_{r \sim j} \mathbf{u}_r^\perp \cdot \mathbf{u}_{r+} - \frac{2(\alpha_j^n)^2}{\gamma-1} \left(\sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \right)^2 \right] + \\
 &\quad + \frac{\delta t^3}{2M_j^2} \frac{(\alpha_j^n)^2}{\gamma-1} \left(\sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \right) \left(\sum_{r \sim j} \mathbf{u}_r^\perp \cdot \mathbf{u}_{r+} \right).
 \end{aligned}$$

En conclusion, on a

$$\begin{aligned}
 p_j^{n+1} &= p_j^n - (\alpha_j^n)^2 \frac{\delta t}{M_j} \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r + (\gamma - 1) \frac{\delta t}{V_j^{n+1}} \sum_{r \sim j} (p_r - p_j^n) \mathbf{C}_{j,r} \cdot (\mathbf{u}_j^n - \mathbf{u}_r) + \\
 &\quad + \frac{\delta t^2}{V_j^{n+1} M_j} \left[(\alpha_j^n)^2 \left(\sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \right)^2 - \frac{\gamma-1}{2} \left| \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} p_r \right|^2 - \frac{M_j}{2} (\gamma \pi + p_j^n) \sum_{r \sim j} \mathbf{u}_r^\perp \cdot \mathbf{u}_{r+} \right] + \\
 &\quad + \frac{\delta t^3}{2V_j^{n+1} M_j} (\alpha_j^n)^2 \left(\sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \right) \left(\sum_{r \sim j} \mathbf{u}_r^\perp \cdot \mathbf{u}_{r+} \right).
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Le terme qui nous intéresse ici, et qui peut poser problème est $\frac{\delta t}{M_j} (\alpha_j^n)^2 \sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r$ qui correspond à la discrétisation de la divergence de la vitesse.

Théorème 6 Soit $D(\mathbf{x}) = \sum_j \left(\sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r \right) \frac{1_{\Omega_j}(\mathbf{x})}{V_j}$. Supposons que les hypothèses du théorème 3 soient vérifiées. Alors

$$D - \nabla \cdot \mathbf{u} = \left(\frac{\beta_2^2}{\beta_1^2} + \frac{\beta_2}{\beta_1^2} \right) O(h), \tag{B.6}$$

au sens faible dans $H^{-1}(\Omega)$.

Démonstration. La preuve est identique à celle faite pour le théorème 3 en utilisant le lemme 2. \square

Remarque 37 *Supposons que l'impédance acoustique soit constante égale à α . Ce théorème nous dit que l'erreur faite sur le terme $\sum_{r \sim j} \mathbf{C}_{j,r} \cdot \mathbf{u}_r$ est de l'ordre de $(1 + \frac{1}{\alpha}) O(h)$. Remarquons maintenant que pour calculer la pression (B.5), ce terme est multiplié par $\alpha^2 \frac{\delta t}{M_j}$. L'erreur globale commise sur la pression est alors de l'ordre de $\frac{\delta t}{M_j} (\alpha^2 + \alpha) O(h)$. Or*

$$\begin{aligned} \frac{\delta t}{M_j} &\approx \frac{h}{\alpha V_j}, \\ &\approx \frac{1}{\alpha h}. \end{aligned}$$

Donc l'erreur globale commise sur le calcul de la pression est de l'ordre de $(1 + \alpha) O(1)$ et est multipliée par l'impédance. Il est alors clair qu'une impédance très élevée peut entraîner des problèmes sur les pressions obtenues dans les mailles. De notre point de vue, des problèmes peuvent apparaître lorsque que le coefficient adimensionné $\frac{p}{\alpha |\mathbf{u}|}$ est petit.

B.2.2 Résultat numérique

Dans cette sous partie, nous regardons l'influence de l'impédance acoustique sur l'erreur de consistance. Pour cela, nous reprenons le cas du vortex de la section 5.2.5. Cependant, nous prenons une impédance initialement constante et très élevée. Nous supposons le domaine $[0, 1] \times [0, 1]$ rempli par un *stiffened gas* d'équation d'état

$$p(\rho, e) = (\gamma - 1) \rho e - \gamma \pi,$$

où $\gamma = 1.4$ et $p_\infty = 10^{12}$. Le fluide est initialement caractérisé par

$$\begin{aligned} \rho(x, y) &= 1, \\ u(x, y) &= 2 \sin^2(\pi x) \sin(\pi y) \cos(\pi y), \\ v(x, y) &= -2 \sin(\pi x) \cos(\pi x) \sin^2(\pi y), \\ p &= 1000. \end{aligned}$$

La densité a ici été prise constante pour que l'impédance acoustique soit constante à l'instant initial. Celle-ci vaut initialement $\alpha \approx 1.18E6$ dans tout le domaine. Le domaine est discrétisé par un maillage quadrangulaire quelconque généré avec Gmsh (voir figure B.2). Nous observons alors la pression obtenue avec notre schéma après une seule itération (figure

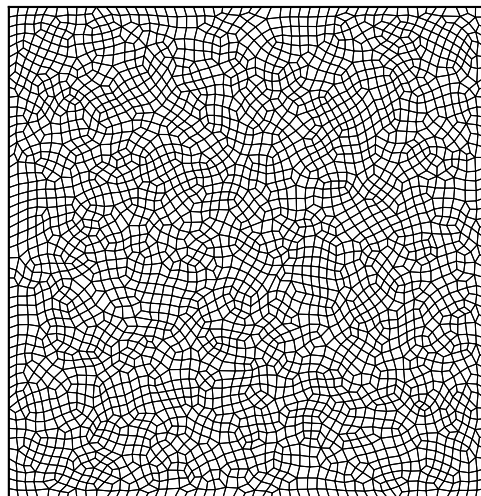


FIGURE B.2 – Vortex. Maillage initial.

B.3). Précisons que la pression est censée rester constante. Or, nous remarquons qu'après une seule itération celle-ci devient négative. Cela montre que l'erreur commise sur le calcul de la pression est dépendante de l'impédance acoustique.

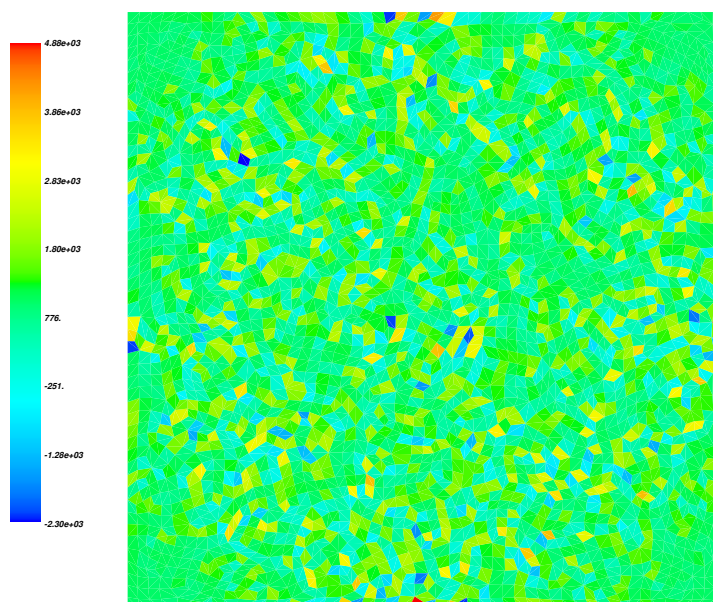


FIGURE B.3 – Vortex. Pression après une itération.

Remarque 38 *Ce problème est aussi visible avec GLACE et EUCCCLHYD.*

D'autre part, précisons que ce problème, au moins sur ce cas, n'empêche pas la poursuite des calculs. En effet, les pressions nodales restent correctes ce qui permet de poursuivre les calculs.

B.3 Sensibilité aux modes en sablier

Nous reprenons ici le cas test présenté dans [Caramana et Shashkov 1998; Maire 2011] qui vise à étudier la sensibilité des schémas numériques aux modes en sablier. Pour cela on discrétise le domaine $[0, 1] \times [0, 1]$ grâce à un maillage cartésien 10×10 . Les mailles sont ici naturellement indexées par un couple (i, j) . Ce domaine est initialement rempli par un gaz parfait de constante adiabatique $\gamma = \frac{5}{3}$, de densité $\rho = 1$ et de pression $p = 1$. La vitesse est initialisée telle que $\mathbf{u}_{i,j} = \left((-1)^{i+j}, 0 \right)$. Le pas de temps est fixé à $\delta t = 10^{-2}$. On observe sur la figure B.4 que notre schéma est, comme GLACE et au contraire d'EUCCCLHYD, très sensible à ces modes en sablier.

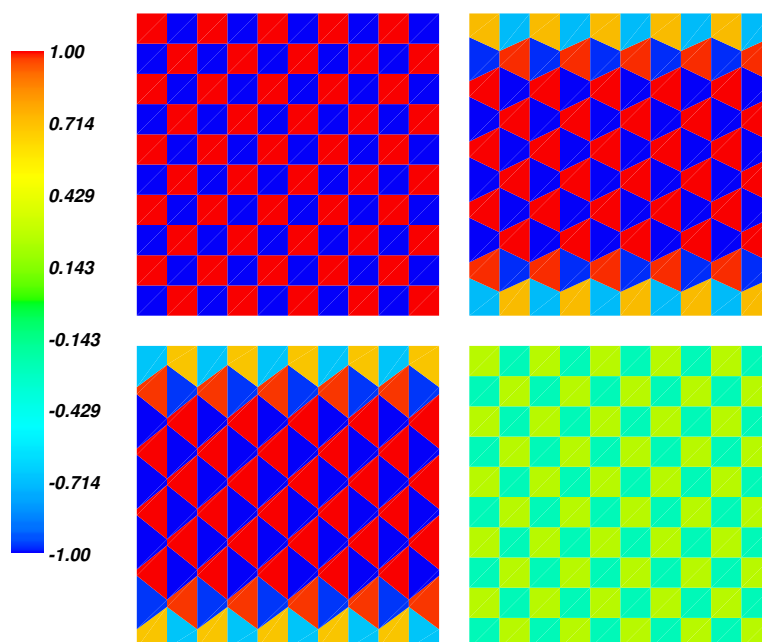


FIGURE B.4 – Mode en sablier. Profil de la première composante de la vitesse initiale (haut gauche) et après cinq itérations pour notre schéma (haut droit), GLACE (bas gauche) et EUCCCLHYD (bas droit).

B.4 Quelques résultats pour le développement tridimensionnel

Nous nous intéressons ici à l'extension de notre schéma à des espaces tridimensionnels. Plus particulièrement, nous voulons regarder l'impact d'une telle extension sur les coefficients calculés au théorème 2 et dans la relation (4.11). En dimension trois, il faut utiliser les coordonnées sphériques autour des noeuds, le vecteur nodal \mathbf{n}_θ utilisé dans notre solveur nodal devient alors

$$\mathbf{n}_{\theta,\phi} = - \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\phi) \\ \sin(\theta) \sin(\phi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad (\text{B.7})$$

où $\theta \in [0, \pi]$ et $\phi \in [0, 2\pi]$. Considérons ici, un cas d'un problème de Riemann unidimensionnel défini par le plan orthogonal au vecteur normal $\mathbf{N} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Dans un premier temps on cherche à déterminer les couples (θ, ϕ) qui définissent des points situés au dessus du plan défini ci-dessus. On cherche donc

$$\{(\theta, \phi), \mathbf{n}_{\theta,\phi} \cdot \mathbf{N} \geq 0\}. \quad (\text{B.8})$$

Or il est clair que

$$\{(\theta, \phi), \mathbf{n}_{\theta,\phi} \cdot \mathbf{N} \geq 0\} = \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \times [0, 2\pi]. \quad (\text{B.9})$$

Considérons maintenant le problème de Riemann suivant

$$\mathbf{W}(\theta, \phi) = \begin{cases} \mathbf{W}_1 & \text{si } (\theta, \phi) \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \times [0, 2\pi], \\ \mathbf{W}_2 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

L'extension de notre solveur nodal en dimension trois peut s'écrire

$$\begin{aligned} p(\theta, \phi) + \alpha(\theta, \phi) \mathbf{u}(\theta, \phi) \cdot \mathbf{n}_{\theta,\phi} &= \tilde{p}_r(\theta, \phi) + \alpha(\theta, \phi) \mathbf{u}_r \cdot \mathbf{n}_{\theta,\phi}, \\ \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \tilde{p}_r(\theta, \phi) \sin(\theta) \mathbf{n}_{\theta,\phi} d\theta d\phi &= \mathbf{0}, \\ \left(\int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \frac{\sin(\theta)}{\alpha(\theta,\phi)} d\theta d\phi \right) p_r &= \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \frac{\sin(\theta)}{\alpha(\theta,\phi)} \tilde{p}_r d\theta d\phi. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Il est évident que les valeurs nodales \mathbf{u}_r et p_r ainsi obtenues ne dépendent que de la répartition angulaire des variables autour du noeud. On peut donc, dans notre cas de problème de Riemann unidimensionnel, écrire le solveur nodal sous la forme

$$\begin{aligned} A_r \mathbf{u}_r &= \alpha_1 A_r^1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 A_r^2 \mathbf{u}_2 + p_1 \mathbf{n}_r^1 + p_2 \mathbf{n}_r^2, \\ \Gamma_r p_r &= \Gamma_r^1 p_1 + \Gamma_r^2 p_2 + \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_r^1 + \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_r^2, \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

B.4. QUELQUES RÉSULTATS POUR LE DÉVELOPPEMENT TRIDIMENSIONNEL

avec

$$\begin{aligned}
A_r &= \alpha_1 A_r^1 + \alpha_2 A_r^2, \\
A_r^1 &= \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} \mathbf{n}_{\theta,\phi} \otimes \mathbf{n}_{\theta,\phi} \sin(\theta) d\theta d\phi, \\
A_r^2 &= \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=\frac{\pi}{2}}^{\pi} \mathbf{n}_{\theta,\phi} \otimes \mathbf{n}_{\theta,\phi} \sin(\theta) d\theta d\phi, \\
\mathbf{n}_r^1 &= \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} \mathbf{n}_{\theta,\phi} \sin(\theta) d\theta d\phi, \\
\mathbf{n}_r^2 &= \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=\frac{\pi}{2}}^{\pi} \mathbf{n}_{\theta,\phi} \sin(\theta) d\theta d\phi, \\
\Gamma_r &= \Gamma_r^1 + \Gamma_r^2, \\
\Gamma_r^1 &= \frac{1}{\alpha_1} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} \sin(\theta) d\theta d\phi, \\
\Gamma_r^2 &= \frac{1}{\alpha_2} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=\frac{\pi}{2}}^{\pi} \sin(\theta) d\theta d\phi.
\end{aligned} \tag{B.13}$$

B.4.1 Calcul de \mathbf{n}_r^1 et \mathbf{n}_r^2

Remarquons que $\int_0^{2\pi} \cos(\phi) d\phi = \int_0^{2\pi} \sin(\phi) d\phi = 0$. Donc les deux premières composantes de \mathbf{n}_r^1 et \mathbf{n}_r^2 sont nulles. D'autre part, on sait que $\cos(\theta + \frac{\pi}{2}) \sin(\theta + \frac{\pi}{2}) = -\cos(\theta) \sin(\theta)$, donc

$$\mathbf{n}_r^2 = -\mathbf{n}_r^1. \tag{B.14}$$

Il suffit alors de calculer la troisième composante de \mathbf{n}_r^1 ,

$$\begin{aligned}
\int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} \cos(\theta) \sin(\theta) d\theta d\phi &= 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta, \\
&= \pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(2\theta) d\theta, \\
&= -\frac{\pi}{2} [\cos(2\theta)]_0^{\frac{\pi}{2}}, \\
&= \pi.
\end{aligned}$$

Donc

$$\mathbf{n}_r^1 = -\mathbf{n}_r^2 = -\pi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \pi \mathbf{N}. \tag{B.15}$$

B.4.2 Calcul de A_r^1 et A_r^2

Remarquons dans un premier temps que

$$\mathbf{n}_{\theta,\phi} \otimes \mathbf{n}_{\theta,\phi} = \begin{pmatrix} \sin^2(\theta) \cos^2(\phi) & \sin^2(\theta) \cos(\phi) \sin(\phi) & \sin(\theta) \cos(\theta) \sin(\phi) \\ \sin^2(\theta) \cos(\phi) \sin(\phi) & \sin^2(\theta) \sin^2(\phi) & \sin(\theta) \cos(\theta) \sin(\phi) \\ \sin(\theta) \cos(\theta) \sin(\phi) & \sin(\theta) \cos(\theta) \sin(\phi) & \cos^2(\theta) \end{pmatrix}.$$

On rappelle que

$$A_r^1 = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} \mathbf{n}_{\theta,\phi} \otimes \mathbf{n}_{\theta,\phi} \sin(\theta) d\theta d\phi. \tag{B.16}$$

B.4. QUELQUES RÉSULTATS POUR LE DÉVELOPPEMENT TRIDIMENSIONNEL

De plus, $\int_0^{2\pi} \cos(\phi) \sin(\phi) d\phi = \int_0^{2\pi} \sin(\phi) d\phi = 0$. On peut donc en conclure que seuls les termes diagonaux de A_r^1 (et A_r^2 pour les mêmes raisons) sont non nuls. De plus, on sait aussi que $\sin^2(\theta + \frac{\pi}{2}) = \sin^2(\theta)$ et $\cos^2(\theta + \frac{\pi}{2}) = \cos^2(\theta)$. D'où, un simple changement de variable nous donne

$$A_r^1 = A_r^2. \quad (\text{B.17})$$

Il suffit donc maintenant de calculer les termes diagonaux de A_r^1 . Les trois coefficients à calculer sont

$$\begin{aligned} a_1 &= \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} \sin^3(\theta) \cos^2(\phi) d\theta d\phi, \\ a_2 &= \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} \sin^3(\theta) \sin^2(\phi) d\theta d\phi, \\ a_3 &= \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2(\theta) \sin(\theta) d\theta. \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Remarquons que

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \cos^2(\phi) d\phi &= \int_0^{2\pi} \frac{1+\cos(2\phi)}{2} d\phi, \\ &= \pi + \frac{1}{4} [\sin(2\phi)]_0^{2\pi}, \\ &= \pi. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

De même

$$\int_0^{2\pi} \sin^2(\phi) d\phi = \pi. \quad (\text{B.20})$$

De plus

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^3(\theta) d\theta &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{3\sin(\theta) - \sin(3\theta)}{4} d\theta, \\ &= -\frac{3}{4} [\cos(\theta)]_0^{\frac{\pi}{2}} + \frac{1}{12} [\cos(3\theta)]_0^{\frac{\pi}{2}}, \\ &= \frac{2}{3}. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Enfin

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^2(\theta) \sin(\theta) d\theta &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin(\theta) + \sin(3\theta)}{4} d\theta, \\ &= -\frac{1}{4} [\cos(\theta)]_0^{\frac{\pi}{2}} - \frac{1}{12} [\cos(3\theta)]_0^{\frac{\pi}{2}}, \\ &= \frac{1}{3}. \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

En résumé on obtient

$$\begin{aligned} A_r^1 &= A_r^2 = \frac{2\pi}{3} Id, \\ A_r &= \frac{2\pi}{3} (\alpha_1 + \alpha_2) Id. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

B.4.3 Calcul de Γ_r^1 et Γ_r^2

Rappelons que

$$\begin{aligned} \Gamma_r &= \Gamma_r^1 + \Gamma_r^2, \\ \Gamma_r^1 &= \frac{1}{\alpha_1} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} \sin(\theta) d\theta d\phi, \\ \Gamma_r^2 &= \frac{1}{\alpha_2} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=\frac{\pi}{2}}^{\pi} \sin(\theta) d\theta d\phi. \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

B.4. QUELQUES RÉSULTATS POUR LE DÉVELOPPEMENT TRIDIMENSIONNEL

Or

$$\int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} \sin(\theta) d\theta d\phi = -2\pi [\cos(\theta)]_0^{\frac{\pi}{2}}, \quad (\text{B.25})$$

$$= 2\pi.$$

De la même manière, on a

$$\int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=\frac{\pi}{2}}^{\pi} \sin(\theta) d\theta d\phi = -2\pi. \quad (\text{B.26})$$

Donc

$$\begin{aligned} \Gamma_r^1 &= \frac{2\pi}{\alpha_1}, \\ \Gamma_r^2 &= \frac{2\pi}{\alpha_2}, \\ \Gamma_r &= 2\pi \left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

B.4.4 Conclusion

En résumant les calculs précédents on obtient

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_r &= \frac{\alpha_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \mathbf{u}_2}{\alpha_1 + \alpha_2} + \frac{3}{2} \frac{p_1 - p_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \mathbf{N}, \\ \left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2} \right) p_r &= \frac{p_1}{\alpha_1} + \frac{p_2}{\alpha_2} + \frac{1}{2} (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) \cdot \mathbf{N}. \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

Les coefficients obtenus au théorème 2 et en (4.11) sont donc légèrement modifiés. L'impact d'une telle modification peut être importante. Il pourrait donc, en dimension trois, être intéressant d'appliquer une modification des coefficients pour assurer que notre solveur dégénère vers le solveur acoustique sur les cas unidimensionnels.

Résumé :

Cette thèse s'intéresse à la simulation numérique de l'explosion vapeur. Ce phénomène correspond à une vaporisation instantanée d'un volume d'eau liquide entraînant un choc de pression. Nous nous y intéressons dans le cadre de la sûreté nucléaire. En effet, lors d'un accident entraînant la fusion du coeur du réacteur, du métal fondu pourrait interagir avec de l'eau liquide et entraîner un tel choc. On voudrait alors connaître l'ampleur de ce phénomène et les risques d'endommagements de la centrale qu'il implique.

Pour y parvenir, nous utilisons pour modèle les équations d'Euler dans un cadre Lagrangien. Cette description a l'avantage de suivre les fluides au cours du temps et donc de parfaitement conserver les interfaces entre l'eau liquide et sa vapeur. Pour résoudre numériquement les équations obtenues, nous développons un nouveau schéma de type Godunov utilisant des flux nodaux. Le solveur nodal développé durant cette thèse ne dépend que de la répartition angulaire des variables physiques autour du noeud.

De plus, nous nous intéressons aux changements de phase liquide-vapeur. Nous proposons une méthode pour les prendre en compte et mettons en avant les avantages qu'il y a à l'implémentation de ce phénomène dans un algorithme Lagrangien.

Mots clés :

Hydrodynamique Lagrangienne, Schémas de type Godunov, Dynamique des gaz compressible, Écoulements multi-fluides, Explosion vapeur, Changement de phase liquide-vapeur.

Abstract :

This thesis studies numerical simulation of steam explosion. This phenomenon correspond to a fast vaporization of a liquid leading to a pressure shock. It is of interest in the nuclear safety field. During a core-meltdown crisis, molten fuel rods interacting with water could lead to steam explosion. Consequently we want to evaluate the risks created by this phenomenon.

In order to do it, we use Euler equations written in a Lagrangian form. This description has the advantage of following the fluid motion and consequently preserves interfaces between the liquid and its vapor. To solve these equations, we develop a new Godunov type scheme using nodal fluxes. The nodal solver developed here only depends on the angular repartition of the physical variables around the node.

Moreover, we study liquid-vapor phase changes. We describe a method to take it into account and highlight the advantages of using this method into a Lagrangian framework.

Keywords :

Lagrangian hydrodynamics, Godunov type schemes, Compressible gas dynamics, multi-fluid flows, Steam explosion, Liquid-vapor phase change.